

Conductivité dans le modèle de Hubbard bi-dimensionnel à faible couplage

par

Dominic Bergeron

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès sciences (Ph.D.)

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec. Canada, 28 avril 2011



Library and Archives
Canada

Published Heritage
Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Direction du
Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 978-0-494-83282-0

Our file Notre référence
ISBN: 978-0-494-83282-0

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

Le 16 juin 2011

*le jury a accepté la thèse de Monsieur Dominic Bergeron
dans sa version finale.*

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Bertrand Reulet
Membre
Département de physique

Monsieur Peter Hirschfeld
Membre externe
University of Florida

Professeur Claude Bourbonnais
Président rapporteur
Département de physique

À mes parents

Sommaire

Le modèle de Hubbard bi-dimensionnel (2D) est souvent considéré comme le modèle minimal pour les supraconducteurs à haute température critique à base d'oxyde de cuivre (SCHT). Sur un réseau carré, ce modèle possède les phases qui sont communes à tous les SCHT, la phase antiferromagnétique, la phase supraconductrice et la phase dite du *pseudogap*. Il n'a pas de solution exacte, toutefois, plusieurs méthodes approximatives permettent d'étudier ses propriétés de façon numérique. Les propriétés optiques et de transport sont bien connues dans les SCHT et sont donc de bonne candidates pour valider un modèle théorique et aider à comprendre mieux la physique de ces matériaux. La présente thèse porte sur le calcul de ces propriétés pour le modèle de Hubbard 2D à couplage faible ou intermédiaire. La méthode de calcul utilisée est l'approche auto-cohérente à deux particules (ACDP), qui est non-perturbative et inclue l'effet des fluctuations de spin et de charge à toutes les longueurs d'onde. La dérivation complète de l'expression de la conductivité dans l'approche ACDP est présentée. Cette expression contient ce qu'on appelle les corrections de vertex, qui tiennent compte des corrélations entre quasi-particules. Pour rendre possible le calcul numérique de ces corrections, des algorithmes utilisant, entre autres, des transformées de Fourier rapides et des splines cubiques sont développés. Les calculs sont faits pour le réseau carré avec sauts aux plus proches voisins autour du point critique antiferromagnétique. Aux dopages plus faibles que le point critique, la conductivité optique présente une bosse dans l'infrarouge moyen à basse température, tel qu'observé dans plusieurs SCHT. Dans la résistivité en fonction de la température, on trouve un comportement isolant dans le pseudogap lorsque les corrections de vertex sont négligées et métallique lorsqu'elles sont prises en compte. Près du point critique, la résistivité est linéaire en T à basse température et devient progressivement proportionnelle à T^2 à fort dopage. Quelques résultats avec sauts aux voisins plus éloignés sont aussi présentés.

Mots-clés: Hubbard, point critique quantique, conductivité, corrections de vertex

Remerciements

Je remercie d'abord mon superviseur André-Marie, pour sa confiance, sa passion, sa très grande disponibilité, sa gentillesse, sa bonne humeur et tout le reste, la liste est trop longue pour être énumérée. Merci à nos collaborateurs Vasyl et Bumsoo pour leur excellent travail dont cette thèse est la continuation. Un gros merci à Steve Allen pour son aide précieuse durant l'écriture du code et aux autres gens du Centre de Calcul Scientifique de l'université pour leur excellent travail dans l'administration du super ordinateur Mammouth avec lequel presque tous les calculs de cette thèse ont été faits. Merci aussi à Patrick Vachon pour son aide toujours rapide et efficace à régler tous les problèmes d'ordinateurs personnels et de réseau au département. Merci à tous mes collègues, actuels et anciens, du groupe Tremblay, Patrick, Louis-François, Shila, Giovanni, Syed Hassan, Bahman, Dominique, Charles, Sébastien et Mathieu, pour toutes les bonnes discussions, sur la physique ou autre, et pour l'entraide et la solidarité entre collègues, qui nous permet d'avancer et d'atteindre nos buts. Merci à mes amis du "groupe Taillefer élargi", Jean-Philippe, Nicolas, Olivier, Jacques, Johan, David, Manu, Aurélie et Sébastien, pour tous les bons moments. Merci à mes amis de Montréal, pour votre fidélité et votre support. Enfin, un immense merci à toute ma famille, pour votre amour et votre soutien constant, sans lesquels je ne serais pas qui je suis et je n'aurais pas accompli autant.

Table des matières

Sommaire	iv
Table des matières	vi
Table des figures	ix
Introduction	1
1 Méthodologie	8
1.1 Fonctions de Green et théorie des perturbations	8
1.2 La conductivité optique en réponse linéaire pour le modèle de Hubbard . .	20
1.3 Méthode des dérivées fonctionnelles	29
1.4 La conductivité dans la méthode auto-cohérente à deux particules	33
2 Article : Conductivité autour du point critique quantique	35
I Introduction	37
II Méthodologie	39
A Modèle	39
B Conductivité en réponse linéaire	39
C Approche auto-cohérente à deux particules	40
D Conductivité dans l'approche ACDP	44
E Algorithmes de calcul	48
III Résultats numériques	51
A Règle de somme f	51
B Conductivité optique	52
C Résistivité en fonction de la température et du dopage près du point critique quantique	53

IV	Discussion	55
V	Conclusion	57
A	Règle de somme f pour la conductivité	58
B	Identité de Ward	59
C	Transformées de Fourier rapides, splines cubiques et développements asymp- totiques	61
D	Choix des fréquences de Matsubara	69
E	Transformée de Fourier d'une spline cubique	69
F	Prolongement analytique pour la conductivité	70
	Bibliographie	75
3	Complément aux résultats de l'article	77
3.1	Taux de diffusion et fonction spectrale	77
3.2	Résistivité avec paramètres de saut au seconds et troisièmes plus proches voisins	84
	Conclusion	91
A	Règle de somme f pour la conductivité	95
B	Hamiltonien avec champ électro-magnétique	99
C	L'opérateur courant dans la base discrète	102
D	Définition du courant en mécanique classique et semi-classique	107
E	Préfacteur de la conductivité	112
F	Susceptibilité généralisée	114
G	Équation de Bethe-Salpeter	116
H	Résolution de l'équation de Bethe-Salpeter	118
I	Transformée de Fourier rapide	123
J	Transformée de Fourier d'une spline cubique	125

<i>Table des matières</i>	viii
K Prolongement analytique par approximants de Padé	130
L $\chi_{J_x J_x}$ dans la méthode ACDP	134
M Techniques de calcul	153
M.1 Calcul de la self-énergie TPSC	153
M.2 Calcul de $\langle k_x \rangle_0$	159
M.3 Calcul de $\chi_{J_x J_x}(\mathbf{q} = 0, iq_n)$	160
N Vertex irréductible de charge cohérent avec l'<i>ansatz</i> TPSC	184
Bibliographie	203

Table des figures

1.1	Série de perturbation pour la fonction de Green	16
1.2	Équation de Dyson et self-énergie	17
1.3	Équation de Bethe-Salpeter	19
1.4	Fonctionnelle de Luttinger-Ward	31
2.1	Représentation schématique de la fonction de corrélation <i>courant-courant</i> .	48
2.2	Contributions à la règle de somme f	52
2.3	Conductivité optique avec et sans corrections de vertex à différents dopages et températures	52
2.4	Résistivité en fonction de la température à différents dopages près du point critique quantique	54
2.5	Coefficients A et B dans le lissage de la résistivité avec la forme $AT + BT^2$, en fonction du dopage, à partir du point critique quantique	54
3.1	Distribution en énergie de la fonction spectrale à la densité $n = 1.17$	78
3.2	Distribution en énergie de la fonction spectrale à la densité $n = 1.32$	79
3.3	Distribution en énergie de la partie incohérente de la fonction spectrale à la densité $n = 1.32$	80
3.4	Distribution en \mathbf{k} du taux de diffusion et de la fonction spectrale au niveau de Fermi à gauche et près du point critique	81
3.5	Distribution en \mathbf{k} du taux de diffusion et de la fonction spectrale au niveau de Fermi à droite du point critique	82
3.6	Distribution en \mathbf{k} du taux de diffusion et de la fonction spectrale au niveau de Fermi dans le régime pseudogap	83
3.7	Résistivité en fonction de la température avec t' et t'' du côté dopé en électrons	84

3.8	Longueur de corrélation magnétique et position du maximum de la susceptibilité à gauche du point critique avec t' et t'' , du côté dopé en électrons	86
3.9	Résistivité en fonction de la température et longueur de corrélation magnétique à gauche du point critique avec t' et t'' , du côté dopé en trous . .	87
3.10	Distribution en \mathbf{k} du taux de diffusion et de la fonction spectrale au niveau de Fermi à gauche du point critique, du côté dopé en trous	88
3.11	Coefficients A et B en fonction du dopage en électrons pour les lissages $\rho(T) = AT + BT^2$ avec t' et t''	89

Introduction

La découverte de la supraconductivité à haute température critique en 1986 par Johannes Georg Bednorz et Karl Alexander Müller [] a grandement stimulé le développement des approches théoriques pour traiter les systèmes d'électrons fortement corrélés. Cela est dû au fait que les supraconducteurs à haute température critique à base d'oxyde de cuivre (SCHT) possèdent plusieurs phases qui ne peuvent pas être décrites par la théorie des bandes. Par exemple, la théorie de la fonctionnelle de densité prédit que les composés parents, c'est-à-dire non dopés, de ces matériaux sont des métaux, alors qu'il s'agit d'isolants [, ,]. Ce comportement isolant est dû à une forte répulsion de Coulomb locale et est appelé *isolant de Mott*. De plus, à faible dopage, ces matériaux ont une phase antiferromagnétique qui ne peut pas non plus être décrite par une théorie à un électron [,]. Le modèle le plus simple pour représenter ces systèmes est le modèle de Hubbard, qui contient un terme cinétique (K) donnant l'énergie d'électrons indépendants dans un système périodique et un terme d'énergie de répulsion (U) entre deux électrons se trouvant sur un même site du réseau. Le modèle tire son nom de John Hubbard qui l'a étudié au début des années 1960 dans la limite où U est grand par rapport à K en utilisant la technique des équations du mouvement pour les fonctions de Green [,]. Le modèle de Hubbard n'a de solution exacte qu'en une dimension []. En deux ou trois dimensions des méthodes approximatives sont nécessaires pour étudier ses propriétés. Ce modèle permet, entre autre, de décrire la phase isolante de Mott [] et, lorsqu'il y a en moyenne un électron par site, dans la limite où le terme de Coulomb est grand par rapport au terme cinétique, il se transforme pour donner le modèle de Heisenberg, utilisé dans la théorie quantique du magnétisme.

Comme les SCHAT ont des propriétés fortement bi-dimensionnelles, une structure tétragonale et qu'une seule bande croise le niveau de Fermi, le modèle minimal pour les décrire est le modèle de Hubbard bi-dimensionnel (2D) à une bande sur un réseau carré []. Ce modèle a un diagramme de phase très similaire à celui des SCHAT. Autour du

de mi-remplissage, il possède une phase antiferromagnétique [1]. Lorsque l'énergie de répulsion électron-électron est plus grande que la largeur de bande, cette phase est aussi un isolant de Mott [2]. À partir d'un certain dopage en trous ou en électrons, on trouve aussi une phase supraconductrice [3, 4, 5, 6]. Enfin, le modèle de Hubbard 2D a aussi un régime de "pseudogap", caractérisé par une destruction partielle de la surface de Fermi, dû à l'apparition de corrélations spatiales à plus ou moins longue portée [7, 8]. Comme on ne connaît exactement que la limite sans interaction (U nul) et la limite atomique (U infini) de ce modèle, les méthodes de calcul sont toujours du type *faible* ou *fort couplage*, en référence à la limite dans laquelle elles sont valides. En fait, toutes ces méthodes sont exactes lorsque $U = 0$, mais les méthodes dites à fort couplage ne traitent les corrélations à longue portée qu'en champ moyen, ce qui ne permet pas de bien décrire le système à faible U , où des fluctuations à grandes longueur d'onde sont présentes. Notons que, dans un modèle bi-dimensionnel, on ne peut observer de transition de phase avec brisure d'une symétrie continue à température finie [9]. Toutefois, on peut observer un régime dit *classique renormalisé*, dans lequel la longueur de corrélation ξ associée à un mode collectif croît comme $\xi \propto \exp(const/T)$ [10, 11]. Il suffit alors d'un très faible couplage tunnel entre les plans pour qu'une transition de phase apparaisse [12].

Parmi les méthodes à fort couplage, la plus utilisée est la méthode du champ moyen dynamique, ou DMFT pour "Dynamical Mean Field Theory", et sa version sur amas, la CDMFT ("Cellular-" ou "Cluster-DMFT") [13, 14]. Il y a aussi l'approche variationnelle sur amas, ou VCA ("Variational Cluster Approach") [15], la théorie de perturbation sur amas, ou CPT ("Cluster Perturbation Theory") [16], l'approximation dynamique sur amas, ou DCA ("Dynamical Cluster Approximation") [17], et l'approche par diagonalisation exacte d'amas [18]. Les méthodes DMFT, CDMFT, VCA et CPT peuvent être vues comme des cas particuliers de l'approche par fonctionnelle de la self-énergie ("Self-energy Functional Approach") [19]. Puisque ces méthodes utilisent des approximations basées sur des amas finis, elles ne tiennent compte des corrélations spatiales qu'à très courte portée. Ce type d'approximation est valide lorsque U est grand par rapport à K , de sorte que la répulsion coulombienne tend à localiser les particules et donc à limiter dans l'espace les corrélations. Ces méthodes tiennent en général bien compte des corrélations temporelles locales, responsables de la transition de Mott. Quant aux méthodes valides à faible couplage, les plus utilisées sont le groupe de renormalisation fonctionnel [20, 21], l'approche d'échange de fluctuations, ou FLEX ("FLuctuation-EXchange") [22], et la méthode *auto-cohérente à deux particules* (ACDP), ou TPSC ("Two-Particle Self-Consistent") [23, 24].

Une autre approche très utilisée, qui permet d'étudier les systèmes corrélés de taille finie, est la méthode Monte Carlo Quantique (MCQ), ou QMC ("Quantum Monte Carlo") [1]. Cette méthode permet d'obtenir des résultats exacts à l'intérieur d'une certaine erreur qui peut être contrôlée. Par contre, les calculs MCQ pour les systèmes de fermions ont ce qui est appelé "le problème de signe" qui est dû à la propriété d'anticommutation des fermions et fait augmenter l'erreur relative sur les quantités évaluées de façon exponentielle avec le nombre de particules et l'inverse de la température [2]. Malgré le problème de signe, l'approche MCQ permet souvent d'obtenir des résultats à température assez basse pour observer des effets importants des corrélations et ce, sur des systèmes beaucoup plus grands que ce qui est accessible par diagonalisation exacte. La méthode est aussi très utile pour tester la validité des approches approximatives dans des conditions où le problème de signe n'est pas trop grave. L'antiferromagnétisme et la supraconductivité sont prédits numériquement dans le modèle de Hubbard à la fois à faible couplage [3, 4, 5, 6] et fort couplage [7, 8, 9, 10, 11]. Ces résultats sont aussi confirmés par MCQ [12]. Par contre, la phase isolante de Mott n'est prédite qu'à fort couplage, lorsque U est plus grand qu'une valeur critique U_c . L'analyse des résultats sur le modèle de Hubbard montre que la supraconductivité est due à une interaction effective retardée attractive entre les électrons créée par un échange de fluctuations antiferromagnétiques [13, 14].

Dans la littérature expérimentale sur les SHT, les propriétés optiques et de transport sont parmi les plus étudiées. Elles sont donc de bonnes candidates pour valider un modèle théorique de ces matériaux. Pour le modèle de Hubbard 2D, on trouve dans la littérature des résultats de conductivité optique sur des amas, dont ceux obtenus par diagonalisation exacte à température nulle [15, 16] et finie [17] (très haute température) et par Monte Carlo Quantique [18]. La conductivité optique a aussi été calculée récemment par la méthode DCA [19]. Si l'on tente de relier ces résultats aux systèmes infinis, d'une part, lorsque les interactions ne sont pas très fortes, ces derniers sont surtout pertinents pour les propriétés optiques à haute fréquence, qui dépendent de la dynamique locale et des corrélations à courte portée. Lorsque la force des interactions augmente, la conductivité de ces amas converge plus rapidement vers celle du système infini puisqu'elle dépend alors essentiellement des corrélations locales (voir les figures 2 et 3 de [20]). Lorsque les interactions sont faibles, pour bien décrire le système à basse fréquence, dont la conductivité DC, on doit tenir compte des propriétés à grande longueur d'onde, donc des corrélations à longue portée. C'est ce que font les méthodes à faible couplage, qui tiennent compte des corrélations à toutes les longueurs d'onde, mais négligent en grande partie la dynamique

locale, moins pertinente à couplage faible puisque les excitations à une particule sont délocalisées. Dans la littérature, les résultats de conductivité à faible couplage sont surtout obtenus par la méthode FLEX [1, 2, 3] et en théorie des liquides de Fermi [4, 5]. Ces approches sont par contre limitées aux interactions très faibles et au régime liquide de Fermi à haut dopage. La méthode FLEX, par exemple, peut prédire une double occupation négative à des valeurs de couplage qui ne sont pas très élevées [6]. De plus, cette méthode ne prédit pas de régime de pseudogap dans la densité spectrale à une particule résolue en angle [7, 8].

Seuls les calculs sur des systèmes finis de petite taille permettent d'obtenir la conductivité de façon exacte. Dans les approximations à fort et faible couplage qui tentent de prédire les propriétés du modèle de Hubbard sur un réseau infini, des approximations supplémentaires sont nécessaires pour obtenir la conductivité. En pratique, cette fonction est calculée à partir de la fonction de corrélation *courant-courant*. L'approximation la plus simple pour calculer cette fonction de corrélation consiste à prendre en compte l'effet des interactions uniquement sur la fonction spectrale à une particule, c'est-à-dire sur la dispersion et le temps de vie des quasi-particules, et à négliger les corrélations entre quasi-particules. Cela suppose, entre autre, que tous les processus de diffusion peuvent contribuer à la résistivité, alors que, en l'absence de désordre, seul les processus umklapp permettent la relaxation de la quantité de mouvement totale du gaz d'électrons. Cette approximation est valide seulement en dimension élevée, ou encore lorsque le nombre de coordination est grand, et devient exacte en dimension infinie [9]. Par contre, en deux dimensions, le calcul de la fonction de corrélation *courant-courant* doit tenir compte de l'interaction effective entre une quasi-particule et un quasi-trou. Cette interaction est contenue dans ce qu'on appelle les *corrections de vertex*. Ces corrections sont souvent représentées par des processus impliquant des interactions multiples entre quasi-particules, il y en a donc une infinité. Les calculs faits avec FLEX [1, 2, 3] ou la théorie des liquides de Fermi [4, 5] prennent en compte les corrections de vertex associées à certains de ces processus, toutefois ils négligent des corrections qui deviennent importantes dans un régime de fortes fluctuations. Tel que mentionné dans le paragraphe précédent, ces calculs sont donc limités au très faible couplage ou bien au régime liquide de Fermi, qui ne sont pas les cas les plus intéressants, entre autre lorsque l'on cherche à comprendre les résultats expérimentaux. Quant aux résultats de conductivité obtenus par l'approche DCA [10], il sont surtout limités aux hautes fréquences et au couplage fort. L'obstacle principal lorsqu'on tente d'inclure des corrections de vertex dans les calculs de conducti-

vité pour un système infini est que ces dernières sont mathématiquement très lourdes et deviennent rapidement impossible à calculer numériquement lorsque l'ordre du processus augmente. Par conséquent, elles sont souvent négligées par manque de moyens plutôt que parce qu'elles sont réellement négligeables.

L'objectif de la présente thèse est d'abord de calculer la conductivité dans l'approche auto-cohérente à deux particules (ACDP) en incluant les corrections de vertex. Les expressions analytiques de ces corrections dans l'approche ACDP sont obtenues de manière non-perturbative par la méthode des dérivées fonctionnelles. Cette approche, d'une part, ne contient pas l'ambiguïté liée à l'ordre maximal à considérer dans les calculs par théorie des perturbations et, d'autre part, permet de traiter les systèmes à couplage intermédiaire (U comparable à K) et pas seulement à couplage faible. Le travail consiste, en premier lieu à refaire la dérivation de l'expression analytique de la conductivité dans l'approche ACDP, dérivation qui a déjà été faite auparavant, mais qui, étant donnée sa complexité, nécessite une vérification. Cette expression contient un certain nombre d'intégrales impossibles à calculer analytiquement et doit donc être calculée numériquement. Toutefois, les termes représentant les corrections de vertex sont impossibles à calculer par la force brute de calcul des ordinateurs actuels dans un temps acceptable à l'échelle humaine. Le projet comprend donc un important travail de développement d'algorithmes permettant le calcul numérique de la conductivité avec les corrections de vertex dans une durée raisonnable. En pratique, le temps de calcul de la conductivité à un dopage n et une température T donnée doit être assez court pour pouvoir étudier la conductivité dans l'ensemble des régions d'intérêt du diagramme de phase du modèle de Hubbard. Cela nécessite la possibilité de faire le calcul pour plusieurs centaines de points (n, T) dans une durée de quelques semaines avec les ressources informatiques disponibles. Dans ce cas-ci, il s'agit de quelques dizaines de noeuds de calculs à huit processeurs et 16 ou 32 giga-octets de mémoire vive du super-ordinateur Mammouth de l'Université de Sherbrooke. L'étape suivante consiste à traduire les algorithmes en code informatique. Malgré le fait que la méthode ACDP ait été amplement utilisée dans le passé et que plusieurs codes existent pour une partie des calculs, une nouvelle approche, plus optimale que les approches numériques utilisées précédemment, est nécessaire car le temps de calcul est un paramètre critique dans le cas présent. De plus, le langage de programmation C++ sera utilisé, un langage beaucoup plus polyvalent (et actuel !) que le langage FORTRAN, utilisé pour écrire les codes précédents de calculs ACDP.

Dans les calculs en théorie à N -corps à température finie, on utilise l'approche de

Matsubara [1], qui consiste à calculer d'abord des fonctions qui dépendent d'un temps imaginaire ou, dans l'espace de Fourier correspondant, d'une fréquence de Matsubara. Les fonctions ayant un sens physique, qui dépendent d'une fréquence réelle, sont ensuite obtenus par prolongement analytique. Dans le cas de fonctions de Matsubara calculées numériquement, le prolongement analytique est une tâche très ardue car elle consiste mathématiquement à résoudre un système d'équations mal conditionné. Malheureusement, il n'existe pas encore d'approche universellement acceptée et de routines prêtes à l'usage pour accomplir cette tâche. Le résultat obtenu dans l'approche ACDP sera la fonction de corrélation *courant-courant* en fréquence de Matsubara, de laquelle la conductivité en fréquence réelle doit être déduite. Une importante partie du projet consistera donc à développer un algorithme conçu spécifiquement pour le prolongement analytique de cette fonction et à mettre cet algorithme sous forme de code informatique.

Les calculs de conductivité pour le modèle de Hubbard bi-dimensionnel ont pour but de comprendre les résultats expérimentaux de résistivité et de conductivité optique sur les supraconducteurs à base d'oxyde de cuivre. Une fois la phase de développement des algorithmes et de programmation complétée, la phase suivante du projet consiste à étudier ces propriétés dans les régions intéressantes expérimentalement du diagramme de phase. L'une des phase que l'on tente de comprendre dans les SCHT est la phase du pseudogap. Dans la conductivité optique, cette phase est caractérisée par l'apparition d'une structure en creux suivi d'une bosse dans l'infra-rouge moyen (autour de 0.5eV) [2, 3, 4]. Dans les propriétés de transport, le pseudogap est caractérisé par un changement de comportement de la résistivité en fonction de la température. Au dessus de la température de pseudogap T^* , on observe généralement un comportement métallique de la résistivité dans les directions parallèles aux plans de cuivre et oxygène. Lorsque la température baisse sous T^* , dans certains matériaux, la résistivité se met à augmenter [5, 6], alors qu'elle diminue dans d'autres [7, 8]. D'autre part, au dessus de T^* , et dans une certaine plage de dopage autour du point $T^* = 0$, la résistivité devient linéaire en T à basse température [9, 10, 11, 12]. Ce comportement est différent de celui d'un métal normal, pour lequel la résistivité est quadratique à basse température tel que prédit par la théorie des liquides de Fermi. De plus, le coefficient du terme linéaire semble disparaître au même dopage que la supraconductivité du côté sur-dopé [13]. L'analyse des résultats de la thèse permettra de vérifier si ces propriétés sont aussi présentes dans le modèle de Hubbard bi-dimensionnel et, si c'est le cas, d'émettre des hypothèses sur l'origine de ces propriétés dans les matériaux réels.

La structure de la thèse est la suivante : Le chapitre 1 décrit les outils théoriques utilisés dans les calculs et résume la procédure de calcul de la conductivité par l'approche ACDP. Cette procédure est décrite en détails dans l'article qui constitue le chapitre 2. Ce dernier présente les résultats de conductivité optique et de résistivité pour le cas le plus simple du modèle de Hubbard sur un réseau carré à couplage intermédiaire, l'analyse et la discussion de ces résultats et la description détaillée des algorithmes de calcul sont présentés en annexe. Le chapitre 3 présente des résultats complémentaires à ceux de l'article, comprenant des résultats de taux de diffusion et de fonction spectrale et permettant de comprendre mieux les résultats de l'article. Il présente aussi des résultats de résistivité avec termes de saut au-delà des plus proches voisins dans l'Hamiltonien. La discussion des résultats est aussi incluse dans ce dernier chapitre. La conclusion de la thèse, incluant des propositions de projets futurs, constitue le dernier chapitre. La fin de la thèse est constituée d'annexes dont A, J, L et M sont aussi inclus dans l'article, chapitre 2, avec légèrement moins de détails. L'annexe N est un développement original pouvant servir à améliorer l'une des approximations utilisées dans l'approche ACDP. Les autres annexes sont des compléments théoriques aux chapitres 1 et 2.

Chapitre 1

Méthodologie

Ce chapitre est consacré à l'introduction des outils théoriques qui seront utilisés dans la thèse. Il est présumé que le lecteur a des connaissances de base en seconde quantification, en physique statistique et en matière condensée. Pour alléger la notation, on utilise des unités “naturelles” dans lesquelles $\hbar = 1$, la charge élémentaire $e = 1$ et le paramètre de maille du réseau $a = 1$. Les unités réelles sont retrouvées dans l'annexe E. Le chapitre comprend une introduction aux fonctions de Green et à la théorie des perturbations pour le problème à N -corps, une dérivation de la formule de la conductivité optique en réponse linéaire pour le modèle de Hubbard, ensuite une introduction à la méthode des dérivées fonctionnelles utilisée pour nos calculs analytiques, et enfin, un résumé de la procédure utilisée pour calculer la conductivité dans le cadre de la méthode Auto-Cohérente à Deux Particules.

1.1 Fonctions de Green et théorie des perturbations

Dans la théorie à N -corps, on utilise ce qu'on appelle des fonctions de Green et des fonctions de corrélations. Mathématiquement, ces fonctions sont définies de manière formellement identique. Toutefois, la fonction de Green à une particule est généralement appelée simplement “fonction de Green” et le terme “fonction de corrélation” est utilisé pour les fonctions de corrélation d'observables. Quant aux fonctions de corrélation à deux particules générales, elles sont appelées “fonction de Green à deux particules”.

La quantité qui sera utilisée le plus souvent dans cette thèse, qui est aussi la quantité

la plus utilisée en théorie à N -corps, est la fonction de Green retardée à une particule

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, t - t') = -i \left\langle \{c_{\sigma}(\mathbf{r}_i, t), c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j, t')\} \right\rangle \theta(t - t'), \quad (1.1)$$

où $c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j, t') = e^{iHt'} c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j) e^{-iHt'}$ crée une particule de spin σ au site \mathbf{r}_j du réseau et au temps t' et $c_{\sigma}(\mathbf{r}_i, t) = e^{iHt} c_{\sigma}(\mathbf{r}_i) e^{-iHt}$ détruit une particule de même spin au site \mathbf{r}_i et au temps t . On suppose ici que H est indépendant du temps. Les opérateurs $c_{\sigma}(\mathbf{r}_i, t)$ et $c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j, t')$ sont dans la représentation de Heisenberg, dans laquelle la dépendance par rapport au temps se trouve dans les opérateurs plutôt que dans la fonction d'onde. L'anticommutateur $\{, \}$ est utilisé ici car G est une fonction de Green de fermions. Dans le cas des bosons, on utiliserait un commutateur. La notation $\langle O \rangle$ signifie la moyenne thermique de l'opérateur O ,

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} O | n \rangle, \quad (1.2)$$

où $\beta = T^{-1}$ est l'inverse de la température, H est l'opérateur hamiltonien du système et

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle \quad (1.3)$$

est la fonction de partition. Les états $|n\rangle$ forment une base complète d'états à N particules dans la représentation de Heisenberg. La fonction (1.1) est aussi appelée un "propagateur", du fait qu'elle contient l'information sur la propagation des excitations à une particule, soit les quasi-particules ou les quasi-trous. Elle est dite "retardée" parce que la fonction Heaviside assure que la réponse en \mathbf{r}_i au temps t à une perturbation créant une quasi-particule (quasi-trous) en \mathbf{r}_j arrive à un temps t' postérieur à la perturbation. En utilisant la propriété cyclique de la trace, il est facile de montrer que la partie de droite de (1.1) ne dépend que de la différence $t - t'$, d'où la notation $G(t - t')$.

Maintenant, voyons un peu de théorie des perturbation pour le problème à N -corps. La théorie des perturbations ne sera pas utilisée comme outils de calcul dans la thèse, mais plusieurs résultats obtenus dans son contexte et certains concepts qui y sont reliés sont fréquemment utilisés en théorie à N -corps.

D'abord, on écrit l'hamiltonien comme $H = H_0 + V$, où H_0 peut être résolu exactement ou approximativement et V , qui ne commute pas avec H_0 et peut dépendre du temps, est traité comme une perturbation. Avec cette séparation, on définit la représentation

d'interaction, dans laquelle un opérateur O s'écrit

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0t} O e^{-iH_0t}, \quad (1.4)$$

où e^{-iH_0t} est l'opérateur d'évolution dans le temps pour l'hamiltonien H_0 . C'est-à-dire que $|\Psi_0(t)\rangle = e^{-iH_0t}|\Psi_0(0)\rangle$ est une solution l'équation de Shrödinger $i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_0(t)\rangle = H_0|\Psi_0(t)\rangle$. D'autre part, dans la représentation d'interaction, la fonction d'onde s'écrit

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = e^{iH_0t}|\Psi(t)\rangle \quad (1.5)$$

et il est facile de montrer que, si $|\Psi(t)\rangle$ obéit à l'équation de Shrödinger pour H , $|\hat{\Psi}(t)\rangle$ obéit à l'équation

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\hat{\Psi}(t)\rangle = \hat{V}(t)|\hat{\Psi}(t)\rangle, \quad (1.6)$$

où $\hat{V}(t) = e^{iH_0t}V e^{-iH_0t}$. Maintenant, on définit l'opérateur d'évolution dans la représentation d'interaction par

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\hat{\Psi}(t_0)\rangle. \quad (1.7)$$

En substituant cette expression dans (1.6), on obtient l'équation du mouvement pour $\hat{U}(t, t_0)$,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0) = \hat{V}(t)\hat{U}(t, t_0). \quad (1.8)$$

En intégrant cette équation, on obtient une équation intégrale qui se résout de façon itérative. On obtient alors l'expression formelle

$$\hat{U}(t, t_0) = T_t \exp\left(-i \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t')\right), \quad (1.9)$$

où T_t est l'opérateur de produit chronologique qui ordonne les opérateurs en ordre croissant de temps de droite à gauche. Cette expression sera utile dans la prochaine section où sera dérivée l'expression de la conductivité en réponse linéaire.

Notons que, si $U(t, t_0)$ est défini par $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$, on obtient de (1.5) et (1.7) que

$$U(t, t_0) = e^{-iH_0t}\hat{U}(t, t_0)e^{iH_0t_0}. \quad (1.10)$$

Maintenant, si H est indépendant du temps, l'opérateur d'évolution s'écrit simplement

$U(t, t') = e^{-iH(t-t')}$ et, dans la représentation d'interaction,

$$\hat{U}(t, t') = e^{iH_0 t} U(t, t') e^{-iH_0 t'} = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t')} e^{-iH_0 t'}. \quad (1.11)$$

Le facteur de Boltzmann dans la moyenne thermique peut donc s'écrire

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} e^{\beta H_0} e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} \hat{U}(-i\beta, 0). \quad (1.12)$$

On a supposé ici que le temps puisse être complexe, ce qui n'a pas de sens physiquement, mais n'est toutefois pas un problème mathématiquement. Cela nécessite de réécrire l'intégrale dans l'argument de (1.9) comme une intégrale de contour dans le plan complexe. L'opérateur T_t ordonne alors les opérateurs en fonction de leur position sur ce contour. Il n'est toutefois pas nécessaire d'entrer ici dans les détails de ce contour, les définitions utiles dans un cas moins général seront données un peu plus loin. Maintenant en utilisant (1.4), (1.11) et (1.12), la moyenne thermique de $A(t)B(t')$, où $A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$ et $B(t') = e^{iHt'} B e^{-iHt'}$, s'écrit

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \frac{\sum_n \langle n | e^{-\beta H} A(t) B(t') | n \rangle}{Z} \\ &= \frac{\sum_n \langle n | e^{-\beta H_0} \hat{U}(-i\beta, t) \hat{A}(t) \hat{U}(t, t') \hat{B}(t') \hat{U}(t', 0) | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta H_0} \hat{U}(-i\beta, 0) | n \rangle} \\ &= \frac{\langle \hat{U}(-i\beta, t) \hat{A}(t) \hat{U}(t, t') \hat{B}(t') \hat{U}(t', 0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(-i\beta, 0) \rangle_0}, \end{aligned} \quad (1.13)$$

où $\langle \dots \rangle_0$ signifie une moyenne par rapport au système dont l'Hamiltonien est H_0 . Notons que, puisque la trace ne dépend pas de la base, les états $|n\rangle$ peuvent être quelconques. Évidemment, on choisit les états propres de H_0 et c'est ce qui rend les calculs possibles.

Maintenant, pour calculer la fonction (1.13), directement, on devrait développer l'exponentielle dans les opérateurs d'évolution \hat{U} , de sorte que le numérateur et le dénominateur de (1.13) s'écrivent chacun comme une série d'intégrales dans le plan complexe de valeurs moyennes de produits d'opérateurs ordonnés "chronologiquement" sur le contour d'intégration. La tâche à accomplir semble très lourde. Il y a toutefois une astuce mathématique et trois théorèmes qui permettent d'y arriver.

L'astuce consiste à définir une fonction analogue à (1.1), mais dont la coordonnée temporelle est imaginaire, de sorte que l'évolution de tous les opérateurs dans les valeurs moyennes se fasse sur l'axe imaginaire. Les intégrales se font ainsi uniquement sur

l'axe imaginaire plutôt que sur un contour plus compliqué dans le plan complexe []. Commençons par définir cette fonction, appelée *fonction de Green de Matsubara*, et nous verrons plus loin comment retrouver la fonction de Green en temps réel à partir de cette dernière. Supposons que l'on définit un temps imaginaire $t = -i\tau$, où τ est réel, on définit la fonction de Green de Matsubara comme

$$\begin{aligned} G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau - \tau') &= -\langle T_\tau c_\sigma(\mathbf{r}_i, \tau) c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_j, \tau') \rangle \\ &= -\langle c_\sigma(\mathbf{r}_i, \tau) c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_j, \tau') \rangle \theta(\tau - \tau') + \langle c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_j, \tau') c_\sigma(\mathbf{r}_i, \tau) \rangle \theta(\tau' - \tau), \end{aligned} \quad (1.14)$$

où la dépendance des opérateurs sur τ est donnée par $O(\tau) = e^{\tau H} O e^{-\tau H}$. Cette expression définit aussi l'opérateur de produit chronologique dans le temps imaginaire T_τ , qui a le même effet sur les opérateurs dépendants du temps imaginaire que T_t dans le temps réel. Notons qu'ici T_τ est appliqué à un produit d'opérateurs de fermions, qui doit changer de signe lorsque l'ordre de deux de ces opérateurs change. On note aussi que $O^\dagger(\tau)$ n'est pas le conjugué hermitique de $O(\tau)$, contrairement au cas correspondant en temps réel. La fonction (1.14) n'est définie que pour $-\beta < \tau - \tau' < \beta$. De plus, elle a une discontinuité à $\tau = \tau'$ qui donne la relation d'anticommutation des opérateurs de fermions. La propriété cyclique de la trace permet de montrer que

$$G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; -\tau) = -G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; -\tau + \beta), \quad 0 < \tau < \beta. \quad (1.15)$$

C'est-à-dire que $G(\tau)$ est anti-périodique. Comme $G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau)$ est défini sur un intervalle de temps imaginaire fini, on peut l'exprimer comme une série de Fourier,

$$G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ik_n \tau} G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; ik_n), \quad (1.16)$$

où la fréquence k_n doit être défini comme

$$k_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} = (2n+1)\pi T \quad (1.17)$$

pour satisfaire la propriété d'anti-périodicité (1.15). Les fréquences définies ainsi avec un indice impair sont appelées des fréquences de Matsubara fermioniques. Enfin, en utilisant l'anti-périodicité, on peut exprimer $G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; ik_n)$ par la transformée de Fourier de

$G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau)$ sur l'intervalle $]0, \beta[$ seulement,

$$G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; ik_n) = \int_0^\beta d\tau e^{ik_n \tau} G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau). \quad (1.18)$$

Maintenant, pour que la fonction de Green de Matsubara soit utile, on doit pouvoir retrouver la “vraie” fonction de Green, Eq.(1.1), à partir de celle-ci. Pour connaître le lien entre la fonction de Green de Matsubara, Eq.(1.14), et la fonction de Green en temps réel, Eq.(1.1), on utilise la représentation de Lehmann. Pour obtenir cette représentation, on écrit explicitement la moyenne thermique dans la base des états propres de l'hamiltonien du système. ce qui permet de remplacer H dans le facteur de Boltzmann et les opérateurs d'évolution dans le temps par $E_n = \langle n | H | n \rangle$, ensuite on fait la transformée de Fourier (TF) par rapport à $t - t'$. Pour la fonction de Green en temps réel, Eq.(1.1), la représentation de Lehmann est

$$G_\sigma^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) = \frac{1}{Z} \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{nn'} \frac{\langle n | c_\sigma(\mathbf{r}_i) | n' \rangle \langle n' | c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_j) | n \rangle}{\omega + i\eta + E_n - E_{n'}} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}). \quad (1.19)$$

Le “ $i\eta$ ” au dénominateur et la limite $\eta \rightarrow 0$ sont très importants. Lorsque l'on fait la TF sur $t - t'$, la fonction Heaviside de (1.1) pose un problème puisque sa TF n'est pas définie. La solution est d'introduire un facteur $e^{-\eta(t-t')}$ devant cette dernière, avec $\eta > 0$, de sorte que la TF soit définie, et ensuite de prendre la limite $\eta \rightarrow 0$. Cette partie imaginaire infinitésimale dans l'énergie est nécessaire pour toutes les fonctions de corrélations. En effet, si $\eta > 0$ on a affaire à une fonction retardée, donc proportionnelle à $\theta(t - t')$, alors que si $\eta < 0$ il s'agit d'une fonction avancée, proportionnelle à $\theta(t' - t)$, le cas $\eta = 0$ n'est donc pas défini. Maintenant si on applique la procédure menant à (1.19) à la fonction de Green de Matsubara, Eq.(1.14), on obtient

$$G_\sigma^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, ik_n) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n | c_\sigma(\mathbf{r}_i) | n' \rangle \langle n' | c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}_j) | n \rangle}{ik_n + E_n - E_{n'}} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}). \quad (1.20)$$

On note que les expressions (1.19) et (1.20) sont analytiquement la même fonction et que, pour obtenir $G_\sigma^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)$ à partir de $G_\sigma^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, ik_n)$, on remplace ik_n par $\omega + i\eta$ et on prend la limite $\eta \rightarrow 0$. Cette opération est le prolongement analytique. Les expressions

(1.19) et (1.20) sont clairement des cas particuliers de la fonction

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, z) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n | c_{\sigma}(\mathbf{r}_i) | n' \rangle \langle n' | c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j) | n \rangle}{z + E_n - E_{n'}} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}), \quad (1.21)$$

où z est un nombre complexe, qui sera utilisé plus loin.

Une autre fonction importante est la fonction spectrale, définie comme

$$A_{\sigma}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) = -2 \operatorname{Im} G_{\sigma}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega), \quad (1.22)$$

qui, à l'aide de (1.19) et de l'identité

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\eta} = P \frac{1}{x} - i\pi \delta(x), \quad (1.23)$$

s'écrit aussi

$$A_{\sigma}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega) = 2\pi \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \langle n | c_{\sigma}(\mathbf{r}_i) | n' \rangle \langle n' | c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j) | n \rangle e^{-\beta E_n} (1 + e^{-\beta \omega}) \delta(\omega - E_{n'} + E_n). \quad (1.24)$$

D'autre part, l'expression (1.21) se réécrit comme

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\frac{1}{Z} \sum_{nn'} \langle n | c_{\sigma}(\mathbf{r}_i) | n' \rangle \langle n' | c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_j) | n \rangle e^{-\beta E_n} (1 + e^{-\beta \omega}) \delta(\omega - E_{n'} + E_n)}{z - \omega} \quad (1.25)$$

on obtient donc que

$$G_{\sigma}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_{\sigma}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)}{z - \omega}. \quad (1.26)$$

Cette expression est appelée la *représentation spectrale* de la fonction de Green. La raison de cette appellation est que $A_{\sigma}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \omega)$ contient la distribution spectrale des excitations à une particule. L'expression (1.26) est une forme très utile qui permet d'exprimer à la fois la fonction de Green en fréquence de Matsubara et la fonction de Green en fréquence réelle simplement en remplaçant z par une fréquence imaginaire ou réelle. Elle peut être utile entre autre pour faire le prolongement analytique par la méthode d'entropie maximale, lorsque la forme analytique de $G(ik_n)$ n'est pas connue et donc il n'est plus possible de remplacer directement ik_n par $\omega + i\eta$. D'ailleurs, le prolongement analytique ne se fait pas, la plupart du temps, par une simple substitution analytique, puisque l'on ne connaît

généralement pas les états propres de H et on ne peut donc pas utiliser la représentation de Lehmann. Par conséquent, on doit connaître les conditions qui nous assurent que le prolongement analytique est unique, puisqu'il existe une infinité de fonctions continues qui coïncident en une série de points discrets, en l'occurrence les fréquences de Matsubara. Ces conditions nous sont données par un théorème, dû à Baym et Mermin [], qui stipule que si

1. $G(z)$ est analytique dans le plan complexe supérieur,
2. $G(z) = G(ik_n)$ pour tous les ik_n ,
3. $\lim_{z \rightarrow \infty} zG(z) = \text{constante}$,

alors le prolongement analytique est unique.

Ce théorème d'unicité du prolongement analytique est le premier des trois théorèmes mentionnés précédemment et qui rendent les calculs par la théorie des perturbations praticables. Maintenant que l'on sait que l'on peut utiliser le temps imaginaire pour faire nos calculs en pratique, on peut l'utiliser pour calculer les valeurs moyennes de produits d'opérateurs quelconques. Pour ce faire on doit réécrire la fonction (1.13) en temps imaginaire. D'abord, l'opérateur d'évolution (1.9) en temps imaginaire s'écrit

$$\hat{U}(\tau, \tau_0) = T_\tau \exp \left(- \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau' \hat{V}(\tau') \right), \quad (1.27)$$

où $\hat{O}(\tau) = e^{\tau H_0} O e^{-\tau H_0}$. Cette expression peut être obtenue à partir de (1.9) en remplaçant t par $-i\tau$. Elle peut aussi être redérivée de la même façon que (1.9), mais directement en temps imaginaire. D'autre part, lorsqu'on travaille en temps réel, on calcule des valeurs moyennes d'anticommutateurs pour les fonctions de Green ou de commutateurs, de la forme $\langle [A(t)B(t')] \rangle$, pour les fonctions de corrélation. En temps imaginaire le rôle des (anti-)commutateurs est joué par l'opérateur de produit chronologique. On calcule donc toujours des fonctions de la forme $\langle T_\tau A(\tau)B(\tau') \rangle$. En tenant compte de l'ordre chronologique, l'équivalent de l'expression (1.13) s'écrit, en temps imaginaire,

$$\begin{aligned} \langle T_\tau A(\tau)B(0) \rangle &= \frac{\langle \hat{U}(\beta, 0) T_\tau [\hat{U}(0, \tau) \hat{A}(\tau) \hat{U}(\tau, 0) \hat{B}(0)] \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0} \\ &= \frac{\langle T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Le passage de la première à la deuxième ligne se fait en tenant compte du produit chro-

nologique et en utilisant la propriété

$$\hat{U}(\tau, \tau'')\hat{U}(\tau'', \tau') = \hat{U}(\tau, \tau'). \quad (1.29)$$

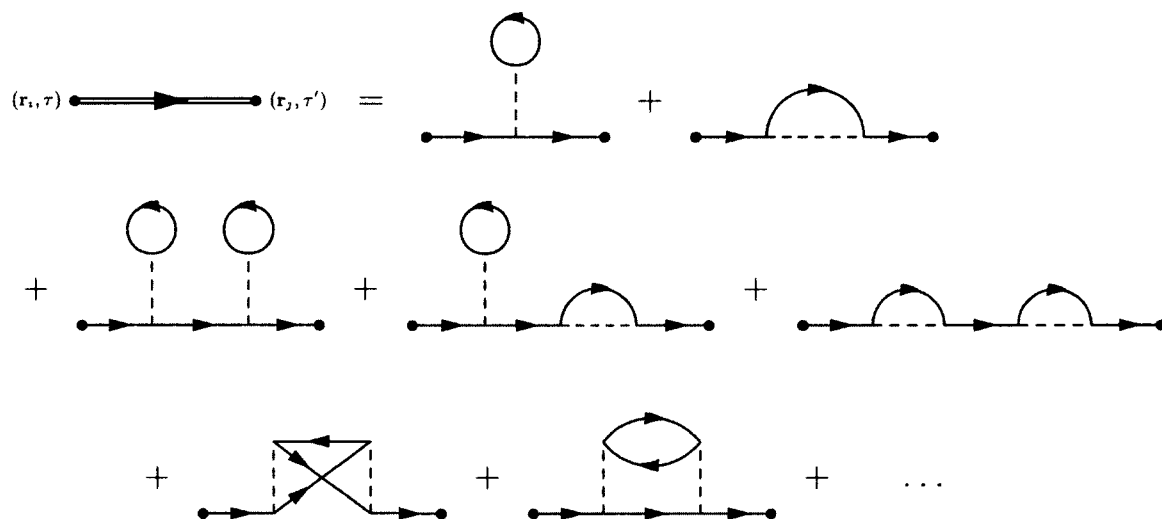


FIGURE 1.1 – Représentation graphique de la série de perturbation pour la fonction de Green. Le double trait est la fonction de Green, ou le propagateur, du système H , les traits simples sont des propagateurs du système H_0 et les traits hachurés représentent le potentiel d'interaction V .

Les deux autres théorèmes mentionnés plus haut sont le théorème de Wick et le théorème des graphes connexes. Il n'est pas nécessaire ici d'énoncer ces deux théorèmes précisément puisque nous n'aurons pas d'avantage besoin de la théorie des perturbations. Mentionnons seulement que le théorème de Wick permet de transformer les valeurs moyennes de produits d'opérateurs prises dans le système sans interactions en une somme de produits de fonctions de Green de Matsubara à une particule. Quant au théorème des graphes connexes, il permet de factoriser, dans la série du numérateur de (1.28), une série égale au dénominateur. La valeur moyenne restante ne contient alors que des termes composés de produits de fonctions de Green connectées les unes autres par des coordonnées communes. Dans une représentation graphique, où les fonctions de Green sont représentées par des traits reliant leurs deux coordonnées, ces termes forment des graphes

connexes. D'après ce théorème. (1.28) devient

$$\begin{aligned} \langle T_\tau A(\tau) B(0) \rangle &= \frac{\langle T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0} \\ &= \langle T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{A}(\tau) \hat{B}(0) \rangle_{0c}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

où $\langle \dots \rangle_{0c}$ signifie la moyenne incluant seulement les graphes connexes. Si on utilise ce résultat pour calculer la fonction de Green Eq.(1.14) pour l'hamiltonien $H = H_0 + V$ où les interactions sont dans le terme V , on obtient la série représentée à figure 1.1. Chaque diagramme de cette figure représente l'intégrale d'un produit de fonctions de Green et de potentiels d'interaction. Les variables d'intégration sont les coordonnées $(\mathbf{r}, \tau, \sigma)$ internes se trouvant à chaque intersection, appelée vertex, des fonctions de Green et des potentiels. La série représentée sur la figure 1.1 se réécrit sous la forme d'une équation intégrale, l'équation de Dyson, représentée à la figure 1.2(a). $\Sigma_{irr.}$ représenté en (b), est la somme

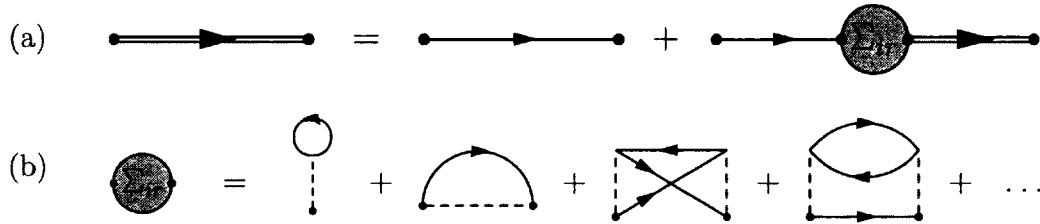


FIGURE 1.2 – Représentation graphique (a) de l'équation de Dyson et (b) de la self-énergie irréductible.

des diagrammes dit irréductibles à une particule, c'est-à-dire ceux qui ne peuvent pas être séparés en deux morceaux en coupant seulement un trait représentant une fonction de Green. Mathématiquement, l'équation de Dyson s'écrit

$$\begin{aligned} G_\sigma(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_j, \tau') &= G_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_j, \tau') \\ &+ \sum_{lm} \int d\tau_1 d\tau_2 G_\sigma^{(0)}(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_l, \tau_1) \Sigma_\sigma(\mathbf{r}_l, \tau_1; \mathbf{r}_m, \tau_2) G_\sigma(\mathbf{r}_m, \tau_2; \mathbf{r}_j, \tau') \end{aligned} \quad (1.31)$$

et sa solution formelle est

$$G_\sigma^{-1}(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_j, \tau') = G_\sigma^{(0)-1}(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_j, \tau') - \Sigma_\sigma(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_j, \tau'), \quad (1.32)$$

où G_σ^{-1} et $G_\sigma^{(0)-1}$ sont les fonctions inverse de G_σ et $G_\sigma^{(0)}$, respectivement. Si le système est

invariant sous translation, c'est-à-dire que les fonctions $G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ et $\Sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ ne dépendent que de la différence $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, leur transformées de Fourier (TF) sont alors diagonales en vecteur d'onde (elles le sont toujours en fréquence). Dans ce cas, la transformée de Fourier de l'équation (1.31) devient, pour un modèle à une seule bande, une simple équation algébrique dont solution est

$$\begin{aligned} G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \frac{1}{G_\sigma^{(0)-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)} \\ &= \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \end{aligned} \quad (1.33)$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}}$ est la relation de dispersion du système sans interaction et μ est le potentiel chimique.

Malgré le fait que l'équation (1.31) ait été introduite ici dans un contexte de théorie des perturbations, elle est parfaitement générale. Elle peut aussi être obtenue par l'équation du mouvement de la fonction de Green, ce qui permet de définir la self-énergie à l'aide de fonctions de Green à deux particules. Cette relation sera présentée dans l'article qui constitue le chapitre suivant.

Pour terminer cette section, voyons les définitions des fonctions de corrélations à deux particules en temps réel et en temps imaginaire. En temps réel, la fonction de corrélation retardée pour les observables A et B est

$$\chi_{AB}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, t - t') = i \langle [A(\mathbf{r}_i, t), B(\mathbf{r}_j, t')] \rangle \theta(t - t') \quad (1.34)$$

et en temps imaginaire, la fonction de corrélation de Matsubara est

$$\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau - \tau') = \langle T_\tau A(\mathbf{r}_i, \tau) B(\mathbf{r}_j, \tau') \rangle. \quad (1.35)$$

Comme mentionné en début de section les fonctions de corrélations à deux particules ont la même forme que la fonction de Green. Par contre, les fonctions à deux particules sont des fonctions bosoniques. C'est pourquoi on utilise un commutateur et non un anticommutateur dans la définition (1.34). D'autre part, lorsque $\tau' > \tau$ dans l'expression (1.35), l'ordre de A et B est inversé sans changement de signe. Par conséquent, encore une fois en utilisant la propriété cyclique de la trace, on montre que

$$\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; -\tau) = \chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; -\tau + \beta), \quad \tau > 0, \quad (1.36)$$

et donc $\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \tau)$ s'écrit comme

$$\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \tau) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-iq_n \tau} \chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; iq_n), \quad (1.37)$$

où

$$q_n = 2n\pi T \quad (1.38)$$

est une fréquence de Matsubara bosonique.

Il y a aussi une représentation spectrale de $\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, z)$, qui s'écrit

$$\chi_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \omega)}{\omega - z}, \quad (1.39)$$

où

$$\chi''_{AB}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \omega) = \text{Im } \chi_{AB}^R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \omega) \quad (1.40)$$

est l'équivalent du poids spectral $A(\omega)$ pour la fonction de Green. Lorsque $A = B$, $\chi''_{AA}(\omega)$, contient l'information spectrale des modes collectifs de l'observable A . Les fonctions de corrélations peuvent s'écrire en fonction des fonctions de Green à deux particules qui, en temps imaginaire, s'écrivent

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2 | \mathbf{r}_3, \tau_3; \mathbf{r}_4, \tau_4) = \langle T_{\tau} c_{\sigma}(\mathbf{r}_1, \tau_1) c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_2, \tau_2) c_{\sigma'}(\mathbf{r}_3, \tau_3) c_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}_4, \tau_4) \rangle. \quad (1.41)$$

Ces fonctions de Green peuvent être calculées par ce qu'on appelle généralement l'équation de Bethe-Salpeter, dérivée à l'origine dans un contexte d'électrodynamique quantique. On pourrait aussi l'appeler l'équation de Dyson à deux particules puisqu'il s'agit de l'exact analogue de l'équation de Dyson, mais pour les fonction de Green à deux particules. Cette équation est représentée sur la figure 1.3. La fonction Γ_{ir} , qu'on appelle le

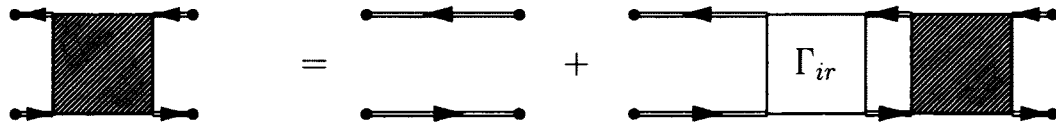


FIGURE 1.3 – Représentation graphique de l'équation de Bethe-Salpeter. Le carré hachuré représente la fonction de Green à deux particules, les longs double-trait représentent la fonction de Green à une particule du système et le carré blanc est le vertex irréductible (la self-énergie pour la fonction de Green à deux particules).

vertex irréductible, est l'équivalent de la self-énergie. La solution formelle est la même que celle de l'équation de Dyson, c'est-à-dire, dans une forme matricielle,

$$G_{\sigma\sigma'}^{-1} = G_{\sigma\sigma'}^{(0)-1} - \Gamma_{ir\sigma\sigma'} . \quad (1.42)$$

Une dérivation de l'équation de Bethe-Salpeter est donnée dans l'annexe G. Cette dérivation utilise des dérivées fonctionnelles, qui sont discutées dans la section 1.3. Une méthode générale de résolution de l'équation de Bethe-Salpeter est donnée dans l'annexe H ainsi que les solutions pour des formes particulières du vertex irréductible Γ_{ir} . La série diagrammatique pour le vertex irréductible s'obtient à partir de la série de Σ_{ir} , Fig.1.2(b), en enlevant un des propagateurs sur chaque diagramme. Chaque diagramme d'ordre deux et plus en interaction produit donc un diagramme pour chacun de ses propagateurs dans la série de Γ_{ir} .

Les fonctions de corrélations d'observables, Eq.(1.35), s'écrivent comme des combinaisons linéaires des fonctions de Green à deux particules (1.41) pour des cas particuliers des indices $(\mathbf{r}_i, \tau_i, \sigma_i)$. Ces fonctions de corrélation s'obtiennent donc d'équations à la Bethe-Salpeter, définies avec le vertex irréductible Γ_{ir}^{AB} associés aux observables A et B .

Un cas particulier qui se résout de façon compacte est celui où Γ_{ir}^{AB} ne dépend que des différences $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $\tau - \tau'$. Dans ce cas, l'équation de Bethe-Salpeter devient mathématiquement identique à l'équation de Dyson, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation (1.35) s'écrit alors

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(\mathbf{q}, iq_n) &= \frac{1}{\chi^{(0)-1}(\mathbf{q}, iq_n) - \Gamma_{ir}^{AB}(\mathbf{q}, iq_n)} \\ &= \frac{\chi^{(0)}(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \Gamma_{ir}^{AB}(\mathbf{q}, iq_n)\chi^{(0)}(\mathbf{q}, iq_n)} , \end{aligned} \quad (1.43)$$

où $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, iq_n)$ est la transformée de Fourier de $\chi^{(0)}(\mathbf{r}_i, \tau; \mathbf{r}_j, \tau') = -2G(\mathbf{r}_i, \tau)G(\mathbf{r}_j, \tau')$, où $G(\mathbf{r}_i, \tau)$ est la fonction de Green à une particule.

1.2 La conductivité optique en réponse linéaire pour le modèle de Hubbard

Soit un hamiltonien

$$H = H_0 + H'(t) , \quad (1.44)$$

où H_0 ne dépend pas du temps. On veut évaluer la valeur moyenne d'un opérateur O lorsque $H'(t)$ est très petit par rapport à H_0 . Supposons que le système est à l'équilibre au temps t_0 , moment à partir duquel la perturbation $H'(t)$ est appliquée de façon adiabatique. La manière de traiter l'adiabaticité sera discutée un peu plus loin. La valeur moyenne de O aux temps t s'écrit

$$\begin{aligned}\langle O(t) \rangle &= \langle U(t_0, t) O U(t, t_0) \rangle \\ &= \langle \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) \rangle\end{aligned}\quad (1.45)$$

où on a utilisé la définition (1.4) pour la représentation d'interaction, la relation (1.10) qui relie $U(t, t_0)$ à $\hat{U}(t, t_0)$, et la propriété cyclique de la trace pour éliminer les facteurs $e^{iH_0 t_0}$ et $e^{-iH_0 t_0}$. Ici, $\langle \dots \rangle$ est une valeur moyenne dans le système à l'équilibre. D'après (1.9), l'opérateur $\hat{U}(t, t_0)$ est donné par

$$\hat{U}(t, t_0) = T_t \exp \left(-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} T_t \left(-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right)^n. \quad (1.46)$$

Lorsque H' est très petit par rapport à H_0 , on peut alors conserver uniquement les deux premiers termes de (1.46) et on obtient

$$\begin{aligned}\langle O(t) \rangle &= \left\langle \left[1 + i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right] \hat{O}(t) \left[1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t') \right] \right\rangle \\ &\approx \langle \hat{O}(t) \rangle - i \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{O}(t), \hat{H}'(t')] \rangle.\end{aligned}\quad (1.47)$$

Si O est le courant dans la direction x à la position \mathbf{r} et la perturbation H' est appliquée à $t_0 = -\infty$ on obtient

$$\langle j_x(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \hat{j}_x(\mathbf{r}, t) \rangle - i \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{j}_x(\mathbf{r}, t), \hat{H}'(t')] \rangle. \quad (1.48)$$

Maintenant, on considère le cas où la perturbation est un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_x(\mathbf{r}, t)\hat{x}$. C'est un choix de jauge commode puisqu'il permet de travailler uniquement avec l'opérateur courant plutôt que de travailler à la fois avec le courant et la densité de charge. Comme on le verra un peu plus loin, le courant comprend une partie diamagnétique, dépendante de \mathbf{A} , et une partie paramagnétique.

Comme on ne s'intéresse qu'aux termes linéaires en A_x , on ne conserve donc de H'

que la partie ayant la forme

$$\hat{H}'(t) = - \int d^d r \hat{j}_x^p(\mathbf{r}, t) A_x(\mathbf{r}, t), \quad (1.49)$$

où \hat{j}_x^p est l'opérateur courant paramagnétique et d est la dimension. Finalement, la partie linéaire en A_x de $\langle j_x(\mathbf{r}, t) \rangle$ est

$$\langle j_x(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \hat{j}_x(\mathbf{r}, t) \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \int d^3 r' \left\langle \left[\hat{j}_x^p(\mathbf{r}, t), \hat{j}_x^p(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle A_x(\mathbf{r}', t'), \quad (1.50)$$

ou encore

$$\langle j_x(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \hat{j}_x(\mathbf{r}, t) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^3 r' \chi_{j_x j_x}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') A_x(\mathbf{r}', t'), \quad (1.51)$$

où

$$\chi_{j_x j_x}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i \left\langle \left[\hat{j}_x^p(\mathbf{r}, t), \hat{j}_x^p(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle \theta(t - t') \quad (1.52)$$

est la fonction de corrélation *courant-courant*.

Dans un espace discret, (1.49) est approximé par

$$H'(t) = - \sum_l \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_l, t) A_x(\mathbf{r}_l, t) \quad (1.53)$$

en supposant que $A_x(\mathbf{r}, t)$ varie peu sur une distance comparable pas du réseau, et on obtient

$$\langle j_x(\mathbf{r}_i, t) \rangle = \langle \hat{j}_x(\mathbf{r}_i, t) \rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_l \chi_{j_x j_x}(\mathbf{r}_i, t; \mathbf{r}_l, t') A_x(\mathbf{r}_l, t'). \quad (1.54)$$

avec

$$\chi_{j_x j_x}(\mathbf{r}_i, t; \mathbf{r}_l, t') = i \left\langle \left[\hat{j}_x^p(\mathbf{r}_i, t), \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_l, t') \right] \right\rangle \theta(t - t'). \quad (1.55)$$

Maintenant, pour obtenir la conductivité, on doit écrire l'hamiltonien en présence du potentiel vecteur. C'est ici que l'on introduit l'hamiltonien de Hubbard, dans ce cas-ci, en présence d'un champ électromagnétique.

$$H(t) = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.56)$$

où $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$. Le facteur de phase dans le terme cinétique est appelé le facteur de Peierls. Tel que montré dans l'annexe B, cette forme respecte l'invariance de jauge. C'est-à-dire qu'en faisant un changement de jauge $\{\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), 0\} \rightarrow \{\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}, t)\}$, l'équation de Shrö-

dingier, ainsi que les valeurs moyennes d'observables sont invariants. Il s'agit évidemment de conditions nécessaires pour que le traitement en présence du champ électromagnétique soit valide. Par contre, l'invariance de jauge ne suffit pas pour assurer que (1.56) tient compte de tous les effets du champ. En principe, pour connaître l'hamiltonien en présence du champ, on devrait débiter avec sa représentation dans l'espace continu et faire la substitution $\mathbf{p} = -i\nabla \rightarrow \mathbf{p} = (-i\nabla - \mathbf{A})$. Par contre, cela nécessiterait de calculer les éléments de matrice de \mathbf{p} et \mathbf{r} dans la base des fonctions de Wannier (les "orbitales" localisées), ce qui n'est pas possible puisque ces fonctions ne sont pas connues explicitement en général. L'approximation de Peierls correspond à supposer que ces orbitales sont très localisées [1].

On veut maintenant obtenir l'opérateur courant pour l'hamiltonien (1.56). Tel que montré dans l'annexe D, le courant est la dérivée fonctionnelle de l'hamiltonien par rapport au potentiel vecteur,

$$j_\mu(\mathbf{r}) = -\frac{\delta H}{\delta A_\mu(\mathbf{r}, t)}, \quad (1.57)$$

où $\mu = x, y, z$. Il s'agit toutefois du cas où H est écrit dans l'espace continu. L'hamiltonien (1.56) est, par contre, écrit dans une base discrète, le courant dans ce cas est alors donné par une dérivée ordinaire. c'est-à-dire,

$$j_\mu(\mathbf{r}_j) = -\frac{\partial H}{\partial A_\mu(\mathbf{r}_j, t)}. \quad (1.58)$$

Lorsque le potentiel vecteur est faible on peut faire un développement de Taylor de l'exponentielle dans (1.56) et, en utilisant le fait que $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ varie peu sur une distance comparable au pas du réseau, l'application de (1.57) donne l'expression (C.12) obtenue dans l'annexe C,

$$\begin{aligned} j_x(\mathbf{r}_l) = & \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) + \frac{i}{2} \sum_{\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta',\sigma} + c_{l+\delta',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\ & + \frac{i}{4} \sum_{\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta'',\sigma} + 2c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l+\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\ & - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta,\sigma} + c_{l-\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\ & - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta',\sigma} + c_{l-\delta',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\ & - \frac{1}{4} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'',\sigma} + 2c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l-\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right), \end{aligned} \quad (1.59)$$

ou encore

$$j_x(\mathbf{r}_l) = j_x^p(\mathbf{r}_l) + j_x^d(\mathbf{r}_l) \quad (1.60)$$

où

$$\begin{aligned} j_x^p(\mathbf{r}_l) = & \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) + \frac{i}{2} \sum_{\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta',\sigma} + c_{l+\delta',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\ & + \frac{i}{4} \sum_{\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta'',\sigma} + 2c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l+\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \end{aligned} \quad (1.61)$$

est le courant paramagnétique et

$$\begin{aligned} j_x^d(\mathbf{r}_l) = & -\frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta,\sigma} + c_{l-\delta,\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) \\ & - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta'\sigma} \delta'_x{}^2 t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta',\sigma} + c_{l-\delta',\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) \\ & - \frac{1}{4} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta''\sigma} \delta''_x{}^2 t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'',\sigma} + 2c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l-\delta'',\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right), \end{aligned} \quad (1.62)$$

le courant diamagnétique. Dans ces expressions, δ , δ' , δ'' sont les vecteurs reliant un site et ses premiers, seconds et troisièmes voisins, respectivement, δ_x est la composante selon x de δ et un indice $l + \delta$ signifie en fait $\mathbf{r}_l + \delta$. Notons que l'on ne note pas explicitement la dépendance sur t de $j_x^d(\mathbf{r}_l)$ pour ne pas changer la notation par rapport à la section précédente, où la dépendance sur t des opérateurs vient de la transformation pour passer en représentation de Heisenberg ou d'interaction, alors que $j_x^d(\mathbf{r}_l)$ est ici en représentation de Shrödinger.

Considérons d'abord le premier terme de (1.54). D'abord, la valeur moyenne à l'équilibre du courant paramagnétique est nulle. D'autre part, puisque les opérateurs $e^{iH_0 t}$ et $e^{-\beta H_0}$ commutent, en utilisant la propriété cyclique de la trace, on a

$$\langle \hat{j}_x(\mathbf{r}_i, t) \rangle = \langle j_x^d(\mathbf{r}_i) \rangle, \quad (1.63)$$

et donc, de (1.62),

$$\begin{aligned}
\langle \hat{j}_x(\mathbf{r}_l, t) \rangle = & -\frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta, \sigma} \rangle + \langle c_{l-\delta, \sigma}^\dagger c_{l\sigma} \rangle \right) \\
& - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} \left(\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta', \sigma} \rangle + \langle c_{l-\delta', \sigma}^\dagger c_{l\sigma} \rangle \right) \\
& - \frac{1}{4} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} \left(\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'', \sigma} \rangle + 2 \left\langle c_{l-\frac{\delta''}{2}, \sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2}, \sigma} \right\rangle + \langle c_{l-\delta'', \sigma}^\dagger c_{l\sigma} \rangle \right).
\end{aligned} \tag{1.64}$$

Pour un système invariant sous translation, cette expression devient

$$\begin{aligned}
\langle \hat{j}_x(\mathbf{r}_l, t) \rangle = & A_x(\mathbf{r}_l, t) \left(- \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta, \sigma} \rangle - \sum_{\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta', \sigma} \rangle \right. \\
& \left. - \sum_{\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'', \sigma} \rangle \right) \\
= & A_x(\mathbf{r}_l, t) \langle k_x \rangle
\end{aligned} \tag{1.65}$$

avec

$$\langle k_x \rangle = - \sum_{\bar{\delta}\sigma} \bar{\delta}_x^2 t_{\bar{\delta}} \langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\bar{\delta}, \sigma} \rangle, \tag{1.66}$$

où $\bar{\delta}$ désignant tous les plus proches voisins. Maintenant, en raison de l'invariance sous translation, $\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\bar{\delta}, \sigma} \rangle$ est indépendant de l et la transformée de Fourier de (1.65) est simplement

$$\langle \hat{j}_x(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \sum_l \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_l} e^{i\omega t} \langle \hat{j}_x(\mathbf{r}_l, t) \rangle = \langle k_x \rangle A_x(\mathbf{q}, \omega). \tag{1.67}$$

Avec la définition de la fonction de Green de matsubara $G_\sigma(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \tau) = -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger \rangle$, on a

$$\langle c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\bar{\delta}, \sigma} \rangle = G_\sigma(\mathbf{r}_l + \bar{\delta}, \mathbf{r}_l; 0^-) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{\delta}} e^{ik_n\eta} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n), \tag{1.68}$$

où $\eta = 0^+$. En reportant cette expression dans (1.66) on obtient

$$\langle k_x \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\bar{\delta}} \bar{\delta}_x^2 t_{\bar{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{\delta}} T \sum_{ik_n} e^{ik_n\eta} \sum_{\sigma} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \tag{1.69}$$

et puisque

$$\begin{aligned} -\sum_{\bar{\delta}} \delta_x^2 t_{\bar{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{\delta}} &= -\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} \left(-\sum_{\bar{\delta}} t_{\bar{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{\delta}} \right) \\ &= -\frac{\partial^2 \epsilon_k}{\partial k_x^2} \end{aligned} \quad (1.70)$$

et

$$T \sum_{i\mathbf{k}_n} e^{i\mathbf{k}_n \eta} \sum_{\sigma} G_{\sigma}(\mathbf{k}, i\mathbf{k}_n) = \langle n_k \rangle, \quad (1.71)$$

on a finalement

$$\langle k_x \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \epsilon_k}{\partial k_x^2} \langle n_k \rangle. \quad (1.72)$$

Maintenant, toujours pour le système invariant sous translation, la fonction (1.55) ne dépend que de la différence entre les indices :

$$\chi_{J_x J_x}(\mathbf{r}_i, t; \mathbf{r}_l, t') = \chi_{J_x J_x}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_l, t - t') \quad (1.73)$$

et le second terme de (1.54) s'écrit donc

$$\sum_l \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{J_x J_x}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_l, t - t') A_x(\mathbf{r}_l, t'). \quad (1.74)$$

Cette expression est une convolution, sa transformée de Fourier est donc le produit des transformées de Fourier de chaque fonction,

$$\chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega) A_x(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.75)$$

De ce résultat et de (1.67), on obtient que la transformée de Fourier de (1.54) est

$$\langle j_x(\mathbf{q}, \omega) \rangle = [\langle k_x \rangle + \chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)] A_x(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.76)$$

Maintenant, la conductivité optique est définie par $\langle j_x(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \sigma_{xx}(\mathbf{q}, \omega) E_x(\mathbf{q}, \omega)$, où $E_x(\mathbf{q}, \omega)$ est le champs électrique. On doit donc réécrire (1.76) en fonction de $E_x(\mathbf{q}, \omega)$.

Or, lorsque le potentiel scalaire $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$, on a

$$\begin{aligned} E(\mathbf{q}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} \\ &= -\frac{\partial}{\partial t} \int d\omega e^{-i(\omega+i\eta)t} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega) \\ &= i \int d\omega e^{-i(\omega+i\eta)t} (\omega + i\eta) \mathbf{A}(\mathbf{q}, \omega), \end{aligned} \quad (1.77)$$

où $\eta = 0^+$. On a donc que $E_x(\mathbf{q}, \omega) = i(\omega + i\eta)A_x(\mathbf{q}, \omega)$. La présence du facteur $e^{\eta t}$ correspond à appliquer le champ de manière adiabatique à partir de $t = -\infty$. Ce facteur assure que l'on considère la réponse causale. En effet, en ajoutant, dans l'expression (1.74), un facteur $e^{\eta t'}$ à $A_x(\mathbf{r}_l, t')$ et un facteur $e^{-\eta t}$ à $\chi_{J_x J_x}(t - t')$, qui suppose une réponse qui disparaît adiabatiquement à $t = \infty$, cela permet de définir la transformée de Fourier de cette expression avec $\chi_{J_x J_x}(t - t')$ proportionnel à $\theta(t - t')$.

En remplaçant $A_x(\mathbf{q}, \omega) = E_x(\mathbf{q}, \omega)/[i(\omega + i\eta)]$ dans (1.76), on obtient

$$\langle j_x(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \frac{\langle k_x \rangle + \chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)}{i(\omega + i\eta)} E_x(\mathbf{q}, \omega) \quad (1.78)$$

et la conductivité optique est donc

$$\sigma_{xx}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\langle k_x \rangle + \chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)}{i(\omega + i\eta)}. \quad (1.79)$$

La forme qui sera utilisé dans les calculs est dérivée dans l'annexe A à partir de (1.79), de la règle de somme f et de la représentation spectrale de $\chi_{J_x J_x}$. Il s'agit de la partie réelle de la conductivité longitudinale, qui s'écrit comme

$$\text{Re} \sigma_{xx}(q_x, \omega) = \frac{\chi_{J_x J_x}(q_x, \omega)}{\omega}, \quad (1.80)$$

où $q_x \rightarrow 0$. Si l'on s'intéresse à la partie imaginaire de $\sigma_{xx}(\omega)$, elle peut être obtenue en utilisant un des relations de Kramers-Krönig. Même si la définition (1.79) ne sera pas utilisée directement, on calculera quand même la valeur de $\langle k_x \rangle$, Eq.(1.72), pour vérifier si la règle de somme f ,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Re} \sigma_{xx}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi_{J_x J_x}''(\omega)}{\omega} = -\langle k_x \rangle, \quad (1.81)$$

est satisfaite. Cette règle de somme est dérivée dans l'annexe A. Pour vérifier cette règle de somme, il ne sera pas nécessaire de faire l'intégrale de $\text{Re } \sigma(\omega)$, il suffira d'utiliser le résultat

$$\chi_{J_x J_x}(iq_n = 0) = -\langle k_x \rangle \quad (1.82)$$

qui découle de la forme spectrale de $\chi_{J_x J_x}$,

$$\chi_{J_x J_x}(iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi_{J_x J_x}''(\omega)}{\omega - iq_n}. \quad (1.83)$$

En pratique, on obtient la fonction de réponse $\chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)$ par le prolongement analytique de

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, iq_n) &= \sum_i \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_l)} e^{iq_n(\tau - \tau')} \chi_{J_x J_x}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_l, \tau - \tau') \\ &= \sum_i \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_l)} e^{iq_n(\tau - \tau')} \left\langle T_\tau \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_i, \tau) \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_l, \tau') \right\rangle \\ &= \frac{T}{N} \left\langle \hat{j}_x^p(\mathbf{q}, iq_n) \hat{j}_x^p(-\mathbf{q}, -iq_n) \right\rangle \end{aligned} \quad (1.84)$$

où

$$\hat{j}_x^p(\mathbf{r}, \tau) = e^{\tau H_0} j_x^p(\mathbf{r}) e^{-\tau H_0} \quad (1.85)$$

et T_τ est l'opérateur de produit chronologique en temps imaginaire. Comme on s'intéresse uniquement aux grandes longueurs d'ondes, plutôt que l'expression (1.61) pour le courant paramagnétique, on peut utiliser l'expression plus simple

$$j_x^p(\mathbf{r}_l) = \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta (c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma}) , \quad (1.86)$$

où δ inclut tous les voisins connectés par un t_δ non nul. Dans la représentation d'interaction, on a

$$\hat{j}_x^p(\mathbf{r}_l, \tau) = \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta (c_{l\sigma}^\dagger(\tau) c_{l-\delta,\sigma}(\tau) + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger(\tau) c_{l,\sigma}(\tau)) . \quad (1.87)$$

On a donc

$$\begin{aligned}
 \left\langle T_\tau \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_i, \tau) \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_l, \tau') \right\rangle = & -\frac{1}{4} \sum_{\delta_1 \delta_2 \sigma_1 \sigma_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \left(\left\langle T_\tau c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{i-\delta_1, \sigma}(\tau) c_{l\sigma}^\dagger(\tau') c_{l-\delta_2, \sigma}(\tau') \right\rangle \right. \\
 & + \left\langle T_\tau c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{i-\delta_1, \sigma}(\tau) c_{l+\delta_2, \sigma}^\dagger(\tau') c_{l, \sigma}(\tau') \right\rangle \\
 & + \left\langle T_\tau c_{i+\delta_1, \sigma}^\dagger(\tau) c_{i, \sigma}(\tau) c_{l\sigma}^\dagger(\tau') c_{l-\delta_2, \sigma}(\tau') \right\rangle \\
 & \left. + \left\langle T_\tau c_{i+\delta_1, \sigma}^\dagger(\tau) c_{i, \sigma}(\tau) c_{l+\delta_2, \sigma}^\dagger(\tau') c_{l, \sigma}(\tau') \right\rangle \right).
 \end{aligned} \tag{1.88}$$

Maintenant, si l'on prend la composante $\mathbf{q} = 0$ de la transformée de Fourier dans l'espace de cette fonction, les quatre termes donnent la même contribution et on obtient

$$\sum_i \left\langle T_\tau \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_i, \tau) \hat{j}_x^p(\mathbf{r}_l, \tau') \right\rangle = - \sum_{i \delta_1 \delta_2 \sigma_1 \sigma_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \left\langle T_\tau c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{i-\delta_1, \sigma}(\tau) c_{l\sigma}^\dagger(\tau') c_{l-\delta_2, \sigma}(\tau') \right\rangle. \tag{1.89}$$

Maintenant, il s'agit d'utiliser une approche particulière au problème à N -corps pour calculer cette expression.

1.3 Méthode des dérivées fonctionnelles

La méthode utilisée dans cette thèse pour calculer la fonction de corrélation *courant-courant* utilise des dérivées fonctionnelles pour calculer les vertex irréductibles à partir d'une self-énergie qui est une fonctionnelle de la fonction de Green et pour calculer les fonctions de corrélations à partir de la fonction de Green. On peut montrer, entre autre avec la théorie des perturbations, qu'il existe une fonctionnelle de la fonction de Green $\Phi[G]$, de laquelle on peut obtenir, par dérivation, les fonctionnelles $\Sigma[G]$ et $\Gamma[G]$ qui, évaluées à la fonction de Green du système, donnent la self-énergie irréductible et le vertex irréductible du système, respectivement. $\Phi[G]$ est appelée la fonctionnelle de Luttinger-Ward [1, 2]. D'autre part, on peut aussi obtenir les fonctions de Green à une ou plusieurs particules par dérivation de ce qu'on appelle la fonction génératrice. Nous allons décrire plus en détail ces fonctionnelles et la fonction génératrice. mais d'abord, rappelons ce que sont les dérivées fonctionnelles.

Soit une fonctionnelle $F[g(x)]$, où x est une variable continue. Une variation infini-

tésimale de F s'écrit

$$\delta F = \int dx \frac{\delta F}{\delta g(x)} \delta g(x), \quad (1.90)$$

où $\frac{\delta F}{\delta g(x)}$ est la dérivée fonctionnelle de F par rapport à g . Cette expression implique que

$$\frac{\delta g(x_1)}{\delta g(x_2)} = \delta(x_1 - x_2). \quad (1.91)$$

Les dérivées fonctionnelles sont donc simplement une généralisation pour un espace continu des dérivées partielles. Elles ont les mêmes propriétés que ces dernières et se manipulent formellement de la même manière.

Dans les calculs par dérivées fonctionnelles, comme il y a beaucoup d'indices, d'intégrales et de dérivées, on utilise la notation abrégée $1 = (\mathbf{r}_1, \tau_1)$. Cette notation peut paraître étrange puisqu'on écrit $2 = 1$ pour signifier $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ et $\tau_1 = \tau_2$. Toutefois, elle permet d'alléger énormément les calculs. On utilise aussi la convention d'Einstein, c'est-à-dire que les indices apparaissant plus d'une fois dans un produit sont sommés ou intégrés. On ajoute par contre une barre sur ces indices pour rendre les expressions plus transparentes. Dans cette notation,

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} = \delta(1 - 3)\delta(2 - 4)\delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.92)$$

signifie en fait

$$\frac{\delta G_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2)}{\delta G_{\sigma'}(\mathbf{r}_3, \tau_3; \mathbf{r}_4, \tau_4)} = \delta_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_3}\delta(\tau_1 - \tau_3)\delta_{\mathbf{r}_2\mathbf{r}_4}\delta(\tau_2 - \tau_4)\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (1.93)$$

On a considéré ici les positions comme étant discrètes et donc cette partie de la dérivée se comporte comme une dérivée ordinaire et donne des deltas de Kronecker, comme pour la partie spin. Les intégrales sont notées, par exemple, comme

$$G_\sigma(1, \bar{2})G_\sigma(\bar{2}, 3) \equiv \sum_{\mathbf{r}_2} \int d\tau_2 G_\sigma(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2)G_\sigma(\mathbf{r}_2, \tau_2; \mathbf{r}_3, \tau_3). \quad (1.94)$$

D'autre part, lorsque l'on travaille en vecteur d'onde et en fréquence, on utilise aussi une notation abrégée, soit $k = (\mathbf{k}, ik_n)$. Par contre on écrit explicitement les coordonnées telles (\mathbf{r}, ik_n) et (\mathbf{k}, τ) .

La fonctionnelle de Luttinger-Ward est définie par la somme des “diagrammes squelettes” irréductibles à deux particules. Comme montré à la figure 1.4, il s'agit de diagrammes fermés, c'est-à-dire qu'ils n'ont aucun indice externe. et qui ne peuvent pas être séparés

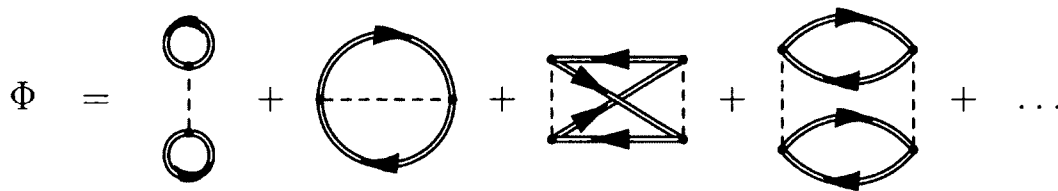


FIGURE 1.4 – Représentation graphique de la fonctionnelle de Luttinger-Ward. Les traits doubles représentent des fonctions de Green “habillées”, c’est-à-dire qu’elles contiennent une self-énergie.

en plusieurs morceaux en coupant seulement deux lignes de fonctions de Green. Notons que, dans le cas du modèle de Hubbard, les second et troisième diagrammes sont nuls puisqu’il n’y a pas de terme d’interaction entre électrons de même spin, alors que tous les propagateurs de ces diagrammes ont le même spin puisque ce dernier est conservé aux vertex. Comme la fonctionnelle de Luttinger-Ward est composée de diagrammes dont tous les indices sont intégrés, il s’agit d’une quantité thermodynamique. Si on définit le potentiel thermodynamique de l’ensemble grand-canonique, ou grand-potentiel, comme

$$\Omega = -T \ln Z, \quad (1.95)$$

où Z est la fonction de partition dans l’ensemble grand-canonique, la fonctionnelle Φ , évaluée à la fonction de Green du système, est reliée à Ω par

$$\Omega = \Phi + \text{Tr} \ln \mathbf{G} - \text{Tr} \Sigma \mathbf{G}, \quad (1.96)$$

où \mathbf{G} et Σ sont la fonction de Green et la self-énergie, respectivement, écrits sous forme matricielle [1].

Maintenant, à la figure 1.2(b), nous avons montrés la série de diagrammes qui composent la self-énergie. Il est facile de voir que, sans tenir compte de la nature des propagateurs, les diagrammes de cette série sont obtenus des diagrammes de la figure 1.4 en enlevant une ligne de propagateur sur chaque diagramme. Cette opération sur les diagrammes correspond mathématiquement à une dérivée fonctionnelle. Explicitement, la self-énergie est donnée par

$$\Sigma_{\sigma}(1,2) = \frac{1}{T} \frac{\delta \Phi}{\delta G_{\sigma}(2,1)}. \quad (1.97)$$

Notons qu’il s’agit ici en fait d’une fonctionnelle de G , tout comme Φ . La self-énergie du

système est obtenue en évaluant cette fonctionnelle à la fonction de Green du système, c'est-à-dire celle qui obéit à l'équation de Dyson. Le résultats dans ce cas ne semblent pas correspondre à la série de la figure 1.2(b), puisque les propagateurs dans cette série sont ceux du système sans interactions. C'est qu'en fait, pour un diagramme donné, en sommant tous les diagrammes d'une certaine classe, on peut obtenir le même diagramme, mais dont les fonctions de Green sont habillées, c'est-à-dire qu'elles contiennent la self-énergie.

En prenant la dérivée fonctionnelle de la self-énergie, on obtient le vertex irréductible,

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}(1, 2; 3, 4) = \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} = \frac{1}{T} \frac{\delta \Phi}{\delta G_{\sigma}(2, 1) \delta G_{\sigma'}(3, 4)}, \quad (1.98)$$

qui permet de définir les fonctions de Green à deux particules par l'équation de Bethe-Salpeter, représentée à la figure 1.3.

D'autre part, si on définit la fonctionnelle

$$\ln Z[\phi] = \ln \left\langle T_{\tau} e^{-c_{\sigma}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\sigma}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\sigma}(\bar{2})} \right\rangle, \quad (1.99)$$

où ϕ est un champ non-local dans l'espace et dans le temps appelé le champ source. On définit ensuite la fonctionnelle

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(1, 2; [\phi]) &= - \frac{\left\langle T_{\tau} e^{-c_{\sigma}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\sigma}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\sigma}(\bar{2})} c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \right\rangle}{\left\langle T_{\tau} e^{-c_{\sigma}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\sigma}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\sigma}(\bar{2})} \right\rangle} \\ &= - \frac{\delta \ln Z[\phi]}{\delta \phi_{\sigma}(2, 1)}, \end{aligned} \quad (1.100)$$

telle que $G_{\sigma}(1, 2) = G_{\sigma}(1, 2; [\phi] = 0)$. La fonctionnelle (1.99) est appelée la fonction génératrice []. En prenant la transformée de Legendre de $-T \ln Z[\phi]$, on obtient le grand potentiel Eq.(1.96).

Enfin, tel que montré dans l'annexe F,

$$\frac{\delta G_{\sigma}(1, 2; [\phi])}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_{\sigma'}(4, 3; [\phi]) G_{\sigma}(1, 2; [\phi]) - \left\langle T_{\tau} c_{\sigma'}^{\dagger}(3) c_{\sigma'}(4) c_{\sigma}^{\dagger}(2) c_{\sigma}(1) \right\rangle_{\phi}. \quad (1.101)$$

D'après cette expression et (1.100), les fonctions de Green à une et deux particules, et donc les fonctions de corrélation, sont obtenues par des dérivées fonctionnelles de la fonction génératrice (1.99).

En utilisant l'équation de Dyson, qui relie la fonction de Green et la self-énergie, on peut ensuite dériver l'équation de Bethe-Salpeter, qui relie la fonction (1.101) au vertex irréductible (1.98). Cette dérivation est faite dans l'annexe G et aussi dans la section *Methodology* de l'article, dans le chapitre suivant.

1.4 La conductivité dans la méthode auto-cohérente à deux particules

Cette section résume rapidement la procédure de calcul de la conductivité avec l'approche auto-cohérente à deux particules (ACDP). La dérivation détaillée est donnée dans la section *Methodology* de l'article, dans le chapitre suivant.

Dans la méthode ACDP, on utilise une hypothèse de départ, un *ansatz*, pour la self-énergie, qu'on nomme $\Sigma^{(1)}$, avec laquelle on obtient des vertex irréductibles pour les susceptibilités de charge et de spin à l'aide de la définition (1.98). Ces susceptibilités sont ensuite calculées à l'aide d'équations du type Bethe-Salpeter. Ensuite, on utilise une relation qui exprime la self-énergie en fonction des vertex irréductibles, des susceptibilités et de la fonction de Green pour obtenir une nouvelle approximation $\Sigma^{(2)}$ (cette relation est dérivée dans l'article). Finalement, un nouveau vertex est obtenu en dérivant $\Sigma^{(2)}$ par rapport à G et $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ est calculé à l'aide de ce vertex et d'une équation à la Bethe-Salpeter.

Ce calcul produit des expressions analytiques comprenant de nombreuses sommes qui doivent être faites numériquement. Malgré les grandes ressources informatiques à notre disposition, ces sommes sont impossible à faire dans une durée raisonnable sans un certain nombre d'astuces mathématiques et algorithmiques. Pour rendre les calculs possibles, on utilise systématiquement les transformées de Fourier rapide (TFR) pour effectuer les sommes qui se mettent sous forme de convolution. Pour faire les transformées de Fourier continues, on utilise l'interpolation par splines cubiques. Les propriétés de régularité des splines cubiques permettent de calculer ces transformées continues de façon très précise et très efficace par TFR. De plus, elles permettent de travailler explicitement avec les développements asymptotiques des fonctions et ainsi de faire les sommes sur les fréquences de Matsubara jusqu'à l'infini. Cela a l'avantage de réduire de beaucoup la fréquence de coupure pour une précision donnée, de réduire ainsi la taille des matrices utilisées et donc les besoins en mémoire vive. En pratique, cela permet surtout de faire

des calculs à beaucoup plus basse température tout en conservant une bonne précision. Ces algorithmes sont résumés dans la section *Methodology* et les détails sont donnés en annexe de l'article.

Enfin, le prolongement analytique de la fonction de corrélation *courant-courant* $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ pour obtenir la conductivité est une étape délicate du calcul. En raison du grand nombre d'étapes dans le calcul $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ et de la précision finie du calcul numérique, le résultat contient un certain bruit. Comme l'approche par approximants de Padé est extrêmement sensible au bruit, en plus de ne pas être fiable à haute température (cette approche est décrite dans l'annexe K) et aucun des codes de prolongement analytique par entropie maximale [] existants n'était adapté à notre problème, un algorithme spécifique, basé sur l'entropie maximale, a été créé pour le calcul de $\text{Re}\sigma(\omega)$ à partir de $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$. Cet algorithme utilise entre autre une spline cubique pour interpoler entre les points discrets du vecteur $\text{Re}\sigma(\omega_j)$, ce qui rend l'algorithme précis et permet ainsi d'obtenir des résultats quantitativement fiables. Des grilles de fréquences de Matsubara et réelles non-uniformes sont aussi utilisées pour réduire le temps de calcul tout en conservant l'information contenue dans $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ et $\text{Re}\sigma(\omega)$. Tout comme pour les algorithmes de calcul de $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$, l'algorithme du prolongement analytique est résumé dans la section *Methodology* de l'article et les détails sont donnés en annexe.

Chapitre 2

Conductivité dans le régime *pseudogap* et autour du point critique quantique antiferromagnétique

Ce chapitre présente l'essentiel du travail de la thèse sous forme d'article. Il comprend les plus importants résultats analytiques, incluant les algorithmes de calcul, les résultats numériques pour l'hamiltonien de Hubbard 2D sur un réseau carré avec sauts aux plus proches voisins et une discussion des résultats.

Après une courte introduction sur les calculs de conductivité dans les systèmes fortement corrélés, la section *Methodology* de l'article présente d'abord le modèle utilisé ainsi qu'une courte dérivation de la formule de la conductivité en réponse linéaire. Ensuite, à titre de rappel, la dérivation de la méthode ACDP, dont le nom anglais est *Two-Particle Self-Consistent* (TPSC) *approach*, est présentée dans la section C. La section D présente ensuite la dérivation de la fonction de corrélation *courant-courant* $\chi_{j_x j_x}$ dans l'approche ACDP, une dérivation qui n'avait pas encore été publiée. Un des points les plus importants de la thèse est l'inclusion des corrections de vertex dans le calcul de $\chi_{j_x j_x}$. Ces corrections sont souvent très importantes dans les fonctions de corrélations de systèmes fortement corrélés, mais elles sont aussi extrêmement lourdes à calculer numériquement. C'est pourquoi la majeure partie du travail de la thèse a été la construction des algorithmes permettant d'inclure ces corrections et la traduction de ces algorithmes en code informatique. Ces derniers sont résumés dans la sous-section E de la section *Methodology*.

Toutefois, comme les détails techniques de ces algorithmes sont plutôt lourds, ces derniers sont présentés en annexe de l'article. La section *Results* suit en présentant d'abord une vérification de la règle de somme f , ensuite des résultats typiques de conductivité optique dans les différents régimes étudiés du diagramme de phase, des courbes de résistivité en fonction de la température dans ces différents régimes et enfin, une analyse du comportement en température de la résistivité en fonction du dopage. La section *Discussion* aborde d'abord l'aspect de la validité de l'approche et l'importance des corrections de vertex. Ensuite, les liens possibles avec les résultats expérimentaux sur les supraconducteurs à base d'oxyde de cuivre sont discutés. Une interprétation physique est donnée pour les résultats numériques les plus importants. La question de l'universalité des résultats observés dans les différents régimes en fonction des paramètres de l'hamiltonien et du dopage est aussi abordée. Enfin, l'effet possible de l'inclusion de désordre sur la contribution des corrections de vertex est discuté.

Contribution des auteurs : La contribution des second et troisième auteurs, respectivement Vasyl Hankevych et Bumsoo Kyung, a été la dérivation de la fonction de corrélation *courant-courant* dans l'approche ACDP, en collaboration avec André-Marie Tremblay. La version de cette dérivation présentée dans la section II.D de l'article, rédigée par le premier auteur et auteur cette thèse, est seulement légèrement différente de la dérivation originale. L'écriture des algorithmes de calculs, résumés dans la section II.E et dont les détails sont présentés dans les annexes C, D et F, le code informatique mettant en application ces algorithmes, la production des résultats, ainsi que l'écriture de l'essentiel de l'article, ont été fait par le présent auteur. Le dernier auteur, le professeur André-Marie Tremblay, en plus de superviser le travail présenté dans l'article à titre de directeur de thèse, a collaboré à la rédaction des commentaires, de la discussion et de l'annexe B.

Cet article a été accepté pour publication dans la revue *Physical Review B : Condensed Matter*, publiée par l'*American Physical Society*.

Optical and DC conductivity of the two-dimensional Hubbard model in the pseudogap regime and across the antiferromagnetic quantum critical point, including vertex corrections

Dominic Bergeron,* Vasyi Hankevych, Bumsoo Kyung, and A.-M. S. Tremblay†
Département de physique, Regroupement Québécois sur les Matériaux de Pointe (RQMP) and Canadian Institute for Advanced Research (CIFAR), Université de Sherbrooke, Quebec, Canada

The conductivity of the two-dimensional Hubbard model is particularly relevant for high-temperature superconductors. Vertex corrections are expected to be important because of strongly momentum dependent self-energies. To attack this problem, one must also take into account the Mermin-Wagner theorem, the Pauli principle and crucial sum rules in order to reach non-perturbative regimes. Here, we use the Two-Particle Self-Consistent approach that satisfies these constraints. This approach is reliable from weak to intermediate coupling. A functional derivative approach ensures that vertex corrections are included in a way that satisfies the f-sum-rule. The two types of vertex corrections that we find are the antiferromagnetic analogs of the Maki-Thompson and Aslamazov-Larkin contributions of superconducting fluctuations to the conductivity but contrary to the latter, they include non-perturbative effects. The resulting analytical expressions must be evaluated numerically. The calculations are impossible unless a number of advanced numerical algorithms are used. These algorithms make extensive use of fast Fourier transforms, cubic splines and asymptotic forms. A maximum entropy approach is specially developed for analytical continuation of our results. These algorithms are explained in detail in appendices. The numerical results are for nearest neighbor hoppings. In the pseudogap regime induced by two-dimensional antiferromagnetic fluctuations, the effect of vertex corrections is dramatic. Without vertex corrections the resistivity increases as we enter the pseudogap regime. Adding vertex corrections leads to a drop in resistivity, as observed in some high temperature superconductors. At high temperature, the resistivity saturates at the Ioffe-Regel limit. At the quantum critical point and beyond, the resistivity displays both linear and quadratic temperature dependence and there is a correlation between the linear term and the superconducting transition temperature. A hump is observed in the mid-infrared range of the optical conductivity in the presence of antiferromagnetic fluctuations.

I. INTRODUCTION

The calculation of transport quantities in strongly correlated electron systems is particularly challenging, but is a necessary step to make contact with a wide class of experiments. Even for the simplest model, namely the single-band Hubbard model, this is a formidable task. Taking up the challenge is all the more important for the two-dimensional case, that acts as the minimal model for the high temperature cuprate superconductors,¹ layered organic superconductors,² and a number of other materials.

Even in cases where one has a good handle on the single-particle Green's function, the difficulty of calculating transport in the 2D Hubbard model stems from the fact that one cannot neglect the effect of vertex corrections when strong momentum-dependent correlations are present. Those vertex corrections are the analog of the self-energy, but for the two-particle response functions. When vertex corrections are not included, conservation laws can be violated and results inaccurate. In the case of small finite systems tractable by exact diagonalization or quantum Monte Carlo calculations (QMC), the correlation function is directly evaluated and vertex corrections are not an issue. However, those results are more relevant for finite frequency conductivity and strong coupling, where correlations are mainly local.³⁻⁸

Consider for example the electrical conductivity for

the two-dimensional Hubbard model. For the infinite system, optical and DC conductivity calculations have been performed without vertex corrections using Dynamical Mean-Field Theory (DMFT)⁹ and Cellular-DMFT (CDMFT)¹⁰. Those calculations have also been done with the composite operator method¹¹ but vertex corrections cannot all be taken into account. For the $t-J$ model, the strong coupling limit of the Hubbard model, a number of approaches have been used, in particular the extended dynamical cluster approximation^{12,13}, but vertex corrections^{14,15} have been neglected. However, recent optical conductivity calculations for the Hubbard model with the dynamical cluster approximation (DCA) took vertex corrections into account^{16,17}. The effects were found to be important only at high frequency. Despite this recent advance, the calculation of vertex corrections with DCA or CDMFT, considered the best available ones at strong coupling,¹⁸⁻²⁰ is still an open problem.

At weak coupling, the Boltzmann equation offers a tractable approach that satisfies conservation laws when one includes scattering-in terms. For linear response, its variational formulation has been used for example to compute the effect of spin fluctuations within the self-consistent renormalized approach²¹ and also to investigate the resistivity near the quantum critical point in the clean²² and disordered cases.^{23,24} The drawback of this approach is that it assumes the existence of quasiparticles and that this assumption is not valid in two dimen-

sions, especially near the pseudogap regime and quantum critical point. Green's function approaches that do not assume quasiparticles are preferable. Hence, some resistivity calculations without vertex corrections were done with the T -matrix approximation²⁵ and with the fluctuation-exchange (FLEX) approximation²⁶. Other FLEX calculations take into account some vertex corrections due to spin and charge fluctuations^{27, 28} and also some due to superconducting fluctuations²⁹. The vertex corrections in FLEX calculations can have important effects on the DC conductivity²⁷⁻²⁹. In Refs. 27 and 28, the antiferromagnetic Maki-Thompson (MK) diagrams were included, but not the Aslamazov-Larkin (AL) ones, claiming that the latter are negligible. A review on those calculations is given in Ref. 30. In Ref. 29, AL diagrams are taken into account for superconducting fluctuations but they are neglected for the spin fluctuations. There are also analytical results for the conductivity with vertex corrections using Fermi liquid theory^{31, 32}.

Despite all these results, we argue that it is still an open problem to reliably compute the electrical resistivity at weak to intermediate coupling for all dopings and temperatures. Hence, in this paper, we extend the Two-Particle Self-Consistent Approach (TPSC)³³⁻³⁶ to include the effect of vertex corrections in the calculation of the resistivity and optical conductivity of the one-band, square lattice, nearest-neighbor two-dimensional Hubbard model for weak to intermediate coupling. This regime corresponds to values of the interaction strength U below the critical value for the Mott transition. We present numerical results as examples and discuss possible links with experiments on cuprates. In particular, we consider the origin of the mid-infrared hump in the electron-doped materials, the Ioffe-Regel limit, insulating behavior in the pseudogap regime and the link between linear resistivity, quantum critical behavior and superconductivity.

The TPSC approach has the following strengths that make it a good choice for the present purposes. In two dimensions, the Mermin-Wagner theorem^{37, 38} prevents the occurrence of antiferromagnetic long-range order at finite temperature. Not many theories can handle that constraint. Because long-range order is prohibited, there is a wide range of temperatures where there are huge antiferromagnetic (spin-density wave) fluctuations in the paramagnetic state. It is in this regime that a fluctuation-induced pseudogap can appear^{34, 39-41}. The standard way to treat fluctuations in many-body theory, the Random Phase Approximation (RPA), leads instead to long-range order and misses this effect. The RPA also violates the Pauli principle in an important way³³. The Fluctuation Exchange Approximation (FLEX)^{42, 43}, and the self-consistent renormalized theory of Moriya-Lonzarich⁴⁴⁻⁴⁶ satisfy the Mermin-Wagner theorem but they do not satisfy the Pauli principle and consistency between one and two-particle quantities. Strengths and weaknesses of these approaches are discussed further in Refs. 34 and 35. Weak coupling renor-

malization group approaches become uncontrolled when the antiferromagnetic fluctuations begin to diverge^{47, 50}. Other approaches include the effective spin-Hamiltonian approach⁵¹. TPSC does not assume a Migdal theorem for spin fluctuations and Kanamori-Brueckner renormalization of the bare interaction is included without adjustable parameter. The conditions for the appearance of a pseudogap induced by antiferromagnetic fluctuations have been verified experimentally in electron-doped cuprates⁵². In addition to the above theoretical considerations, TPSC has been extensively benchmarked against Quantum Monte Carlo calculations in regimes where the latter is available^{33, 34, 36, 40, 53-55}. The agreement between the one-particle spectral function of TPSC and QMC in the pseudogap regime is remarkable⁴⁰. TPSC however fails when temperature is too far below that where the pseudogap appears.

In TPSC, the calculation proceeds in two steps. At the first step, spin-spin and charge-charge correlation functions are obtained with irreducible vertices that are determined self-consistently. That is the origin of the name of the approach. At the second level of approximation, a non-trivial self-energy that is consistent with the spin and charge fluctuations and that can explain fluctuation-induced momentum-dependent pseudogaps is then calculated. The charge-charge correlation function at the first level of approximation satisfies the f -sum rule with the Green's function at the same level, but it misses lifetime effects necessary to obtain non-trivial conductivity. What is needed is a calculation of the current-current correlation function that includes Green's functions dressed at the second level of approximation with the corresponding irreducible vertices. What has been missing up to now is an expression for the corresponding irreducible vertices. Following Baym and Kadanoff,^{56, 57} here we use a functional derivative approach to obtain irreducible vertices that satisfy conservation laws. We check that the f -sum rule is then satisfied with the Green's function obtained at the second-level of approximation. For the conductivity, we show that, not only the Maki-Thompson-type contributions from spin-density wave (SDW) fluctuations, but also the Aslamazov-Larkin contributions are important. The latter have a dramatic effect in the pseudogap regime.

The paper is structured as follows. The next section contains the details of the methodology and is divided into five subsections: IIA, the model, IIB, the conductivity in linear response theory, IIC, a derivation of the TPSC approach for the spin and charge response functions and the one-particle self-energy, IID, the conductivity in the TPSC approach, and finally IIE, a description of the numerical algorithms that were used to calculate the expression given in subsection IID. Section III presents the results for the system considered, followed by a discussion and a conclusion in sections IV and V, respectively. Also, some useful derivations, such as those for the conductivity, the f -sum rule, Ward identities, are given in appendices along with details of algorithms that

are of more general applicability, such as calculating response functions with Fast-Fourier transforms and cubic splines and analytical continuation of numerical data.

II. METHODOLOGY

We first define the model, recall the conductivity formula and introduce TPSC in the functional derivative formalism. This approach allows us, in the fourth subsection, to derive the conductivity formula including vertex corrections. The last subsection briefly describes the numerical algorithms that we implemented. Those are detailed in appendices. In this section, we use units where $e = 1$, $\hbar = 1$ and $a = 1$, a being the lattice parameter. In section III, we use both those units and physical units to allow comparison with typical experimental values.

A. Model

Our model is the two-dimensional Hubbard Hamiltonian in the presence of an electromagnetic field that is treated classically. With the usual Peierls substitution, we have

$$H(t) = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i \int_t^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

where $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, t_{ij} are the hopping matrix elements between the sites of the lattice, $c_{j\sigma}$ destroys a particle with spin σ at site j and $c_{i\sigma}^\dagger$ creates a particle at site i , $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ is the vector potential, U is the on-site repulsion energy and $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ is the spin σ particle number operator at site i . Note that it is perfectly general to use only the vector potential to represent the field, since a scalar potential can always be removed using the proper gauge transformation. The form (1) for the Hamiltonian is justified by gauge invariance. Further discussion of the Peierls substitution may be found in Ref. 58.

B. Conductivity in linear response theory

This derivation of the linear response result will allow us to set the notation. To obtain the conductivity, we first need the expression for the current operator. In the x direction, for example, it is given by

$$j_x^S(\mathbf{r}, t) = - \frac{\delta H}{\delta A_x(\mathbf{r}, t)}, \quad (2)$$

where the superscript S indicates that j_x is in Shrödinger representation, despite its dependance on t . If we apply this definition to Eq. (1), keep terms up to linear order in the vector potential, assuming that $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_x(\mathbf{r}, t)\hat{x}$,

with $A_x(\mathbf{r}, t)$ varying slowly on the scale of a lattice spacing so that

$$\int_i^j dx_{ij} A_x(\mathbf{r}, t) \approx \frac{x_{ij}}{2} (A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_j, t)), \quad (3)$$

where x_{ij} is the x component of the vector $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$, we obtain,

$$j_x^S(\mathbf{r}_l, t) = \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta,\sigma} + c_{l+\delta,\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right), \quad (4)$$

where δ_x is the projection along x of the vector δ between neighbors. t_δ is the corresponding hopping matrix element. This approximation is valid in the case of slowly varying vector potential. For a uniform electric field we can take the vector potential independent of position, which means that we need only the $\mathbf{q} = 0$ component of the current

$$j_x^S(t) = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} - A_x(t) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (5)$$

where $\epsilon_{\mathbf{k}}$ is the dispersion relation and N the number of lattice sites or wave vectors in the Brillouin zone. For the following we need to define the paramagnetic current,

$$j_x^p = - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (6)$$

and the diamagnetic current,

$$j_x^d(t) = -A_x(t) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (7)$$

so that $j_x^S(t) = j_x^p + j_x^d(t)$.

According to linear response theory, the frequency dependent current in response to the field is

$$\langle j_x(\omega) \rangle = \langle \hat{j}_x(\omega) \rangle + \chi_{j_x j_x}(\omega) A_x(\omega) \quad (8)$$

where $j_x(\omega)$ is the Fourier transform of

$$j_x(t) = U^\dagger(t, -\infty) j_x^S(t) U(t, -\infty), \quad (9)$$

where $U(t, t')$ is the time evolution operator for the Hamiltonian $H(t)$, Eq.(1),

$$\chi_{j_x j_x}(\omega) = \frac{i}{N} \int dt e^{i\omega(t-t')} \langle [\hat{j}_x^p(t), \hat{j}_x^p(t')] \rangle \theta(t-t'), \quad (10)$$

is the *current-current* correlation function and the notation $\hat{O}(t)$ stands for the interaction representation of the

operator O , namely, $\hat{O}(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}$, where H_0 is the Hamiltonian Eq (1) with $\mathbf{A} = 0$. Also, $\langle \cdot \rangle$ means an equilibrium average, namely, in the system H_0 .

Since $\langle \hat{j}_x^p(t) \rangle = \langle j_x^p \rangle = 0$, the equilibrium average of the current operator in the interaction representation is given by the diamagnetic term

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_x(t) \rangle &= \langle \hat{j}_x^d(t) \rangle = \langle j_x^d(t) \rangle \\ &= -A_x(t) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

Defining

$$\langle k_x \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (12)$$

where $n_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$, we have

$$\langle \hat{j}_x(t) \rangle = \langle k_x \rangle A_x(t) \quad (13)$$

or, in frequency,

$$\langle \hat{j}_x(\omega) \rangle = \langle k_x \rangle A_x(\omega), \quad (14)$$

and Eq (8) therefore becomes

$$\langle j_x(\omega) \rangle = [\langle k_x \rangle + \chi_{j_x j_x}(\omega)] A_x(\omega) \quad (15)$$

Note that, in the case where the Hamiltonian has only nearest-neighbor hoppings, $\langle k_x \rangle$ is proportional to the local kinetic energy,⁸ but in general it cannot be regarded as such as is clear from Eq (12)

To find the conductivity, it suffices to relate the electric field to the vector potential through

$$E_x(\omega) = i(\omega + i\eta) A_x(\omega), \quad (16)$$

where η is positive and infinitesimal. Thus, the current is related to the electric field by

$$\langle j_x(\omega) \rangle = \frac{\langle k_x \rangle + \chi_{j_x j_x}(\omega)}{i(\omega + i\eta)} E_x(\omega) \quad (17)$$

and finally, since $\langle j_x(\omega) \rangle = \sigma_{xx}(\omega) E_x(\omega)$ by definition, the expression for the optical conductivity in linear response theory is

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{\langle k_x \rangle + \chi_{j_x j_x}(\omega)}{i(\omega + i\eta)} \quad (18)$$

In this work, we calculate only the real part of $\sigma(\omega)$, the dissipative part, and the expression that we use in practice is

$$\text{Re } \sigma_{xx}(\omega) = \frac{\chi_{j_x j_x}''(\omega)}{\omega} \quad (19)$$

which is derived in Appendix A from Eq (A14) to Eq (A16). If one is interested in the imaginary part, it can be obtained using Kramers-Kronig relations

C. Two-Particle Self-Consistent approach

In the Two-Particle Self-Consistent approach (TPSC), one- and two-particle Green's functions for the Hubbard model are calculated in a non-perturbative way. The approach enforces conservation laws, key sum rules and the Pauli principle. It was shown, from benchmarks with quantum Monte Carlo results^{33 34 40 53 55 59}, to be accurate within a few percent for interaction strengths up to about $U = 6t$. We will derive the TPSC approach below, but the reader can also resort to Refs. 34, 35, 55 and 36 for a more detailed discussion of the approach itself and a comparison with other approaches.

In this subsection, we present the key equations for the theory. The following subsection contains details of the derivation. We use the short-hand notation $\mathbf{l} = (\mathbf{r}_1, \tau_1)$ for space and imaginary time coordinates and $q = (\mathbf{q}, i q_n)$ for reciprocal space and Matsubara frequency coordinates.

The *spin* and *charge* response functions must be computed first from the expressions,

$$\begin{aligned} \chi_{sp}(q) &= \frac{1}{N} \int d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau S^z(\mathbf{q}, \tau) S^z(-\mathbf{q}) \rangle \\ &= \frac{\chi_0(q)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q)} \end{aligned} \quad (20)$$

and

$$\begin{aligned} \chi_{ch}(q) &= \frac{1}{N} \int d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau n(\mathbf{q}, \tau) n(-\mathbf{q}) \rangle - \langle n \rangle^2 \\ &= \frac{\chi_0(q)}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q)}, \end{aligned} \quad (21)$$

where T_τ is the *imaginary time*-ordering operator and $\chi_0(q)$ is the Lindhard function, given by

$$\chi_0(q) = -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} G^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) G^{(1)}(\mathbf{k}) \quad (22)$$

Here, $G^{(1)}$ corresponds numerically to a non-interacting Green's function, but has a different functional form. This point will become clear below. Note that we assume here that the system is paramagnetic so that the spin index will often be omitted and the sum over it replaced by a factor of two, as in Eq (22). In Eq (20) and Eq (21), the parameters U_{sp} and U_{ch} are the spin and charge irreducible vertices, respectively. First, U_{sp} is defined by

$$U_{sp} = U \frac{\langle n_\uparrow(1) n_\downarrow(1) \rangle}{\langle n_\uparrow(1) \rangle \langle n_\downarrow(1) \rangle}, \quad (23)$$

so that it can be determined from the fluctuation-dissipation theorem

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} \sum_q \chi_{sp}(q) &= \langle S^z S^z \rangle \\ &= \langle n \rangle - 2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \\ &= \langle n \rangle - \frac{U_{sp}}{U} \frac{\langle n \rangle^2}{2}, \end{aligned} \quad (24)$$

where we have used the Pauli principle $\langle n_\sigma^2 \rangle = \langle n_\sigma \rangle$. Note that all quantities on right-hand side of Eq.(24) are local ones. Then, once U_{sp} is known, and therefore the double occupancy, U_{ch} can be determined from

$$\frac{T}{N} \sum_q \chi_{ch}(q) = \langle n \rangle + 2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - \langle n \rangle^2. \quad (25)$$

We also call Eq.(24) and Eq.(25) the *local spin* and *local charge* sum rules.

Finally, with the response functions (20) and (21) we can obtain the one-particle self-energy,

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(k) = U n_{-\sigma} + \frac{U T}{8 N} \sum_q [3 U_{sp} \chi_{sp}(q) + U_{ch} \chi_{ch}(q)] G_\sigma^{(1)}(k+q) \quad (26)$$

whose form will be explained below. Expressions (20), (21) and (26) are the basic equations of TPSC.

1. First step: spin and charge susceptibilities

First let us derive expressions (20) and (21) for the spin and charge susceptibilities. In the following, we use Einstein's convention for the sums (or integrals), namely that an index appearing twice or more in an expression is summed over lattice sites and integrated over imaginary time. An overbar helps clarify which indices are involved. The approach follows the Martin-Schwinger techniques⁶⁰ described in Kadanoff and Baym's book⁵⁷.

It is convenient to introduce a "source field" $\phi_\sigma(1, 2)$ that couples to one-particle excitations in the system. It allows us to easily obtain correlation functions from functional derivatives. The source field can be set to zero at the end of the calculation. The source-field dependent Green's function in the grand canonical ensemble is then given by

$$G_\sigma(1, 2; \{\phi\}) = - \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_\tau e^{-c_\sigma^\dagger(\bar{1}) \phi_\sigma(\bar{1}, \bar{2}) c_\sigma(\bar{2})} c_\sigma(1) c_\sigma^\dagger(2) \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_\tau e^{-c_\sigma^\dagger(\bar{1}) \phi_\sigma(\bar{1}, \bar{2}) c_\sigma(\bar{2})} \right]} = - \langle T_\tau c_\sigma(1) c_\sigma^\dagger(2) \rangle_\phi \quad (27)$$

where $K = H - \mu N$, μ being the chemical potential and N the number operator. We have also used the notation $\langle \dots \rangle_\phi$ which means that the average is taken with the source field turned on. Response functions can be obtained from functional derivatives of G_σ with respect to $\phi_{\sigma'}$ since

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2; \{\phi\})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_{\sigma'}(4, 3; \{\phi\}) G_\sigma(1, 2; \{\phi\}) - \langle T_\tau c_{\sigma'}^\dagger(3) c_{\sigma'}(4) c_\sigma^\dagger(2) c_\sigma(1) \rangle_\phi. \quad (28)$$

We also have

$$\begin{aligned} \chi_{sp}(1, 2) &= \langle T_\tau S^z(1) S^z(2) \rangle \\ &= \langle T_\tau [n_\uparrow(1) - n_\downarrow(1)] [n_\uparrow(2) - n_\downarrow(2)] \rangle \\ &= 2 (\langle T_\tau n_\uparrow(1) n_\uparrow(2) \rangle - \langle T_\tau n_\uparrow(1) n_\downarrow(2) \rangle), \end{aligned} \quad (29)$$

where we have used spin rotation symmetry to obtain the last line from the previous one. For the charge response function, the corresponding expression is

$$\begin{aligned} \chi_{ch}(1, 2) &= \langle n(1) n(2) \rangle - \langle n(1) \rangle \langle n(2) \rangle \\ &= 2 (\langle T_\tau n_\uparrow(1) n_\uparrow(2) \rangle + \langle T_\tau n_\uparrow(1) n_\downarrow(2) \rangle) \\ &\quad - \langle n(1) \rangle \langle n(2) \rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

According to Eq. (28), the last two results Eqs. (29) and (30) can be written as

$$\chi_{ch/sp}(1, 2) = -2 \left(\frac{\delta G_\uparrow(1, 1^+; \{\phi\})}{\delta \phi_\uparrow(2^+, 2)} \pm \frac{\delta G_\uparrow(1, 1^+; \{\phi\})}{\delta \phi_\downarrow(2^+, 2)} \right) \Big|_{\{\phi\}=0}, \quad (31)$$

where the expressions with the plus and minus sign correspond respectively to the charge and spin response functions. Here, $1^+ = (\mathbf{r}_1, \tau_1 + \epsilon)$, where ϵ is positive and infinitesimal. For the remainder of this section, we implicitly assume that derivatives with respect to ϕ are evaluated at $\{\phi\} = 0$.

To obtain integral equations for the response functions, one begins with

$$G_\sigma(1, \bar{1}) G_\sigma^{-1}(\bar{1}, 2) = \delta(1 - 2). \quad (32)$$

Taking the functional derivative of this equation with respect to $\phi_{\sigma'}(3, 4)$, taking $2 \rightarrow \bar{2}$, multiplying on the right by $G_\sigma(\bar{2}, 2)$ and summing over $\bar{2}$, we obtain

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = -G_\sigma(1, \bar{1}) \frac{\delta G_\sigma^{-1}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (33)$$

On the other hand, Dyson's equation in the presence of the field ϕ reads

$$G_\sigma^{-1}(1, 2) = G_\sigma^{(0)-1}(1, 2) - \phi_\sigma(1, 2) - \Sigma_\sigma(1, 2), \quad (34)$$

where $G_\sigma^{(0)}$ is the non interacting Green's function and Σ_σ is the self-energy, so that

$$\frac{\delta G_\sigma^{-1}(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = -\delta(1 - 3) \delta(2 - 4) \delta_{\sigma\sigma'} - \frac{\delta \Sigma_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}, \quad (35)$$

and therefore, from (33),

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} &= G_\sigma(1, 3) G_\sigma(4, 2) \delta_{\sigma\sigma'} \\ &\quad + G_\sigma(1, \bar{1}) \frac{\delta \Sigma_\sigma(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} G_\sigma(\bar{2}, 2). \end{aligned} \quad (36)$$

Following Luttinger and Ward⁶¹, Σ_σ is a functional of G_σ and $G_{-\sigma}$, we find, applying the chain rule, that

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_\sigma(1, 3)G_\sigma(4, 2)\delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{1})\frac{\delta \Sigma_\sigma(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma(\bar{3}, \bar{4})}\frac{\delta G_\sigma(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (37)$$

This is the Bethe-Salpeter for the *particle-hole* channel. Defining the *particle-hole* irreducible vertex

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}(1, 2; 3, 4) = \frac{\delta \Sigma_\sigma(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)}, \quad (38)$$

Eq. (37) reads

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_\sigma(1, 3)G_\sigma(4, 2)\delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{1})\Gamma_{\sigma\sigma'}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4})\frac{\delta G_\sigma(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (39)$$

The spin and charge response functions in Eq. (31) are special cases of the more general functions

$$\chi_\pm(1, 2; 3, 4) = -2 \left(\frac{\delta G_\uparrow(1, 2; \{\phi\})}{\delta \phi_\uparrow(3, 4)} \pm \frac{\delta G_\uparrow(1, 2; \{\phi\})}{\delta \phi_\downarrow(3, 4)} \right). \quad (40)$$

It is straightforward to show, from the Bethe-Salpeter equation Eq. (39) and spin-rotational invariance, that

$$\chi_\pm(1, 2; 3, 4) = -2G(1, 3)G(4, 2) \pm \Gamma_{ch/sp}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4})G(1, \bar{1})G(\bar{2}, 2)\chi_\pm(\bar{3}, \bar{4}|3, 4) \quad (41)$$

where

$$\Gamma_{ch/sp}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4}) = \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})} \pm \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\downarrow(\bar{3}, \bar{4})} \quad (42)$$

and $G = G_\uparrow = G_\downarrow$.

Up to now, all the results are exact. The first step in TPSC is to obtain a first approximation for the self-energy that will be used to obtain irreducible vertices. First, let us rewrite Dyson's equation Eq. (34) with zero source field in the form,

$$G_\sigma^{(0)-1}(1, \bar{3})G_\sigma(\bar{3}, 2) = \delta(1-2) + \Sigma_\sigma(1, \bar{3})G_\sigma(\bar{3}, 2). \quad (43)$$

Then note that the equation of motion for the Green's function reads

$$\sum_l \left[\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu \right) \delta_{il} + t_{il} \right] G_\sigma(l-j, \tau) = \delta(\tau)\delta_{ij} - U \langle T_\tau n_{i\bar{\sigma}}(\tau) c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger \rangle. \quad (44)$$

or, in compact form,

$$G_\sigma^{(0)-1}(1, \bar{3})G_\sigma(\bar{3}, 2) = \delta(1-2) - U \langle T_\tau n_{\bar{\sigma}}(1) c_\sigma(1) c_\sigma^\dagger(2) \rangle, \quad (45)$$

where $\bar{\sigma} = -\sigma$. By comparing Eqs.(43) and (45) one concludes that

$$\Sigma_\sigma(1, \bar{3})G_\sigma(\bar{3}, 2) = -U \langle T_\tau n_{\bar{\sigma}}(1) c_\sigma(1) c_\sigma^\dagger(2) \rangle. \quad (46)$$

Now, comes our first approximation. We replace the last expression Eq. (46) by

$$\Sigma_\sigma(1, \bar{1})G_\sigma(\bar{1}, 2) \approx U g_{\uparrow\downarrow}(1) G_{\bar{\sigma}}(1, 1^+) G_\sigma(1, 2), \quad (47)$$

where, for the hole-doped case,

$$g_{\uparrow\downarrow}(1) = \frac{\langle n_\uparrow(1) n_\downarrow(1) \rangle}{\langle n_\uparrow(1) \rangle \langle n_\downarrow(1) \rangle}. \quad (48)$$

For the electron-doped case, one replaces n_σ in this expression by $1 - n_\sigma$. Thus, when the lattice is bipartite, particle-hole symmetry of the phase diagram is preserved. It also gives a better agreement with quantum Monte Carlo results when the lattice is not bipartite. Those two different approximation are equivalent to assume that the approximation (47) is made for holes when hole density is smaller than particle density and for particles otherwise. Now, substituting the definition (48) in Eq. (47), it is clear that one recovers the exact result for the self-energy Eq. (46) in the special case $2 = 1^+$. The approximation^{33,62} is justified if it is correct to assume that the four-point correlation function factorizes only when points 1 and 2 are different.

Within this approximation, the self-energy can be obtained by multiplying Eq. (47) by $G_\sigma^{-1}(2, 3)$ from the right and summing over 2, to obtain

$$\Sigma_\sigma^{(1)}(1, 2) = U g_{\uparrow\downarrow}(1) G_{\bar{\sigma}}(1, 1^+) \delta(1-2), \quad (49)$$

which is the self-energy ansatz that is used to define the Green's function $G^{(1)}$ in the Lindhard function (22), from which are defined the TPSC susceptibilities (20) and (21). Note that once the source field ϕ is turned off and translational invariance is restored, $\Sigma_\sigma^{(1)}(1, 2)$ becomes independent of position and its Fourier transform is simply a constant that can be absorbed in the chemical potential in $G_\sigma^{(1)}(k)$, so that this Green's function is in practice a non-interacting one.

Given the self-energy, as well as the result

$$\frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)}{\delta G_\sigma(2, 3)} = \frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)}{\delta G_{-\sigma}(2, 3)}, \quad (50)$$

valid in the paramagnetic phase, and the definition of the spin vertex, Eq.(42), we obtain the spin vertex

$$\Gamma_{sp}(1, 2; 3, 4) = U_{sp} \delta(1-3) \delta(1^+ - 4) \delta(1^- - 2) \quad (51)$$

where $U_{sp} = U g_{\uparrow\downarrow}(1)$. It is possible to obtain an analytical expression for $\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)/\delta G_\sigma(3, 4)$ to compute the charge vertex from the definition (42) and the ansatz (49), but to this day the most successful approach has been to approximate this functional derivative as local, i.e. proportional to $\delta(1-3)\delta(1-4)$, which leads to

$$\Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) = U_{ch} \delta(1-3) \delta(1^+ - 4) \delta(1^- - 2). \quad (52)$$

Substituting in the Bethe-Salpeter equation for the susceptibilities. Eq.(41), we find the corresponding TPSC expressions for the spin (20) and charge (21) susceptibilities. They suffice to determine also U_{ch} .

2. Second step: improved self-energy

Collective modes are generally less influenced by details of the single-particle properties than the other way around since collective modes depend more strongly on general principles like conservation laws. We thus wish now to obtain an improved approximation for the self-energy that takes advantage of the fact that we have found accurate approximations for the low-frequency spin and charge fluctuations. We begin from the general definition of the self-energy Eq.(46) obtained from Dyson's equation.

We start with the longitudinal channel (ϕ diagonal in spin indices) and use the corresponding expression for the correlation function in terms of response function Eq.(28). In that case, the right-hand side of the general definition of the self-energy Eq.(46) may be written as

$$\Sigma_{\sigma}(1, \bar{1}) G_{\sigma}(\bar{1}, 2) = -U \left[\frac{\delta G_{\sigma}(1, 2)}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)} - G_{-\sigma}(1, 1^+) G_{\sigma}(1, 2) \right]. \quad (53)$$

The last term is the Hartree-Fock contribution, which gives the exact result for the left-hand side in the limit $\omega \rightarrow \infty$.³⁴ The $\delta G_{\sigma}/\delta \phi_{-\sigma}$ term is thus a contribution to lower frequencies and it comes from the spin and charge fluctuations. Right-multiplying the last equation by G^{-1} , replacing the lower energy part $\delta G_{\sigma}/\delta \phi_{-\sigma}$ by its general expression in terms of irreducible vertices, Eq.(37), and taking Σ and G on the right-hand side to be the first level approximations $\Sigma^{(1)}$ and $G^{(1)}$, respectively, we find

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, 2) = U G_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+) \delta(1 - 2) - U G_{\sigma}^{(1)}(1, \bar{3}) \frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(1)}(\bar{3}, 2)}{\delta \phi_{\sigma}^{(1)}(\bar{4}, \bar{5})} \frac{\delta G_{\sigma}^{(1)}(\bar{4}, \bar{5})}{\delta \phi_{-\sigma}(1^+, 1)}. \quad (54)$$

If we expand the sum over spins on the right-hand side to express the irreducible vertices in terms of their spin and charge versions Eqs.(42) we find, after using the TPSC vertices, Eqs.(51,52),

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(k) = U n_{-\sigma} + \frac{U T}{4 N} \sum_q [U_{sp} \chi_{sp}(q) + U_{ch} \chi_{ch}(q)] G_{\sigma}^{(1)}(k + q). \quad (55)$$

There is, however, an ambiguity in obtaining the self-energy formula. Indeed, we can obtain an expression for the self-energy by using a transverse source field $\phi_{-\sigma\sigma}$ in Eq.(27). By taking functional derivatives of G with

respect to this ϕ , we first obtain the transverse spin correlation functions $\chi_{+-}(1, 2) = \langle T_{\tau} S_{+}(1) S_{-}(2) \rangle$ and χ_{-+} . Then, using a derivation analogous to that for the longitudinal case,³⁵ we find

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(k) = U n_{-\sigma} + \frac{U T}{2 N} \sum_k U_{sp} \chi_{sp}(q) G_{-\sigma}^{(1)}(k + q). \quad (56)$$

During the derivation, $\chi_{+-}(1, 2) = \chi_{-+}(1, 2) = \frac{1}{2} \chi_{sp}(1, 2)$ was used, taking spin rotational invariance into account.

The two previous expressions for the self-energy clearly show that our approximations for the fully reducible vertex does not preserve crossing symmetry, that is the symmetry under the exchange of two particles or two holes. To improve our approximation and restore crossing symmetry,⁴⁰ we average the two expressions (55) and (56), which gives the final result Eq.(26) that we use in the rest of this paper. It turns out that this ‘‘symmetric’’ expression of the self energy gives a better agreement with quantum Monte Carlo results.⁴⁰ In addition, one verifies numerically that the exact sum rule (Appendix A in Ref. 34)

$$- \int \frac{d\omega'}{\pi} \text{Im} \Sigma_{\sigma}^R(\mathbf{k}, \omega') = U^2 n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}), \quad (57')$$

determining the high-frequency behavior of Σ , is satisfied to a higher degree of accuracy with the symmetrized self-energy expression Eq.(26).

3. Internal accuracy checks

Our final expression for the self-energy $\Sigma^{(2)}$, Eq.(26), is in principle an improvement over the constant self-energy entering the calculation of the susceptibilities. But clearly the approach is not one-particle self-consistent. All the Green's functions entering the right-hand side of Eq.(26) are evaluated with $G^{(1)}$, which has a constant self-energy. The advantage is that all quantities, including the vertices, on the right-hand side of Eq.(26) are computed at the same level of approximation. In fact, one can miss some important physics if this is not the case³⁴.

Apart from comparisons with quantum Monte Carlo (QMC) calculations, we can check the accuracy in other ways. For example, the f -sum rule,

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi_{ch}''(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad (58)$$

is exactly satisfied at the first level of approximation (i.e. with $\langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle^{(1)}$ on the right-hand side) and the charge susceptibility obtained with U_{ch} . Suppose that on the right-hand side of that equation, one uses $\langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ obtained from $G^{(2)}$ instead of the Fermi function. In cases where the agreement with QMC is good, one should find that the

right-hand side does not change by more than a few percent

When we are in the Fermi liquid regime, another way to verify the accuracy of the approach is to verify if the Fermi surface obtained from $G^{(2)}$ satisfies Luttinger's theorem very closely

Finally, the consistency relation between one- and two-particle quantities (Σ and $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$), Eq (46), should be satisfied exactly in the Hubbard model. In the special case where $2 = 1^+$, this relation can be written as

$$\frac{1}{2}\text{Tr}(\Sigma G) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{T}{N} \sum_k e^{ik_n \tau} \Sigma_{\sigma}(k) G_{\sigma}(k) = U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \quad (59)$$

In standard many-body books⁶³, this expression is encountered in the calculation of the free energy through a coupling-constant integration. In TPSC it is not difficult to show (Appendix B of Ref 34) that the following equation

$$\frac{1}{2}\text{Tr}(\Sigma^{(2)} G^{(1)}) = U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \quad (60)$$

is satisfied exactly with the self-consistent $U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ obtained from the sum rule (24). An internal accuracy check consists in verifying by how much $\frac{1}{2}\text{Tr}(\Sigma^{(2)} G^{(2)})$ differs from $\frac{1}{2}\text{Tr}(\Sigma^{(2)} G^{(1)})$. Again, in regimes where we have agreement with Quantum Monte Carlo calculations, the difference is only a few percent.

The above relation between Σ and $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ gives us another way to justify our expression for $\Sigma^{(2)}$, Eq (26). Suppose one starts from (55) to obtain a self-energy that contains only the longitudinal spin fluctuations and the charge fluctuations, as was done in the first papers on TPSC³³. One finds that the spin part and the charge part each contribute an amount $U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle / 2$ to the consistency relation Eq (60). Similarly, if we work only in the transverse spin channel^{35, 40}, we find that each of the two transverse spin components also contributes $U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle / 2$ to $\frac{1}{2}\text{Tr}(\Sigma^{(2)} G^{(1)})$. Hence, averaging the two expressions also preserves rotational invariance since each spin component contributes equally to Eq (60). Note that Eq (26) for $\Sigma^{(2)}$ is different from so-called Berk-Schrieffer type expressions⁶⁴ that contains only bare vertices and do not satisfy (Appendix E in Ref 34) the consistency condition between one- and two-particle properties, Eq (59).

D. Conductivity in the Two-Particle Self-Consistent approach

To compute $\text{Re } \sigma(\omega)$ from the Kubo formula Eq (19), we have to obtain the *current-current* correlation function given by Eq (10), which contains the $\mathbf{q} = 0$ component of the paramagnetic current. From the general expression for the current Eq (4), we have

$$j_x^p = \sum_l j_x^p(\mathbf{r}_l) = i \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_{\delta} \sum_l c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l-\delta\sigma} \quad (61)$$

Since, the actual calculation is done in Matsubara frequency instead of the real-frequency definition of the current correlation function Eq (10), we use

$$\chi_{j_x j_x}(iq_n) = \frac{1}{N} \int dt e^{iq_n(\tau-\tau')} \langle T_{\tau} \hat{j}_x^p(\tau) \hat{j}_x^p(\tau') \rangle, \quad (62)$$

where $\hat{j}_x^p(\tau) = e^{\tau H_0} j_x^p e^{-\tau H_0}$ and $q_n = 2n\pi T$, with n integer, is a bosonic Matsubara frequency. Substituting (61) in this expression gives

$$\begin{aligned} \langle T_{\tau} \hat{j}_x^p(\tau) \hat{j}_x^p(\tau') \rangle = & - \sum_{l\delta_1\delta_2\sigma_1\sigma_2} \delta_{x1}\delta_{x2}t_{\delta_1}t_{\delta_2} \\ & \times \langle T_{\tau} c_{l\sigma}^{\dagger}(\tau_1) c_{l-\delta_1\sigma}(\tau_1) c_{l\sigma}^{\dagger}(\tau_2) c_{l-\delta_2\sigma}(\tau_2) \rangle \end{aligned} \quad (63)$$

If we substitute the functional derivative expression for the correlation function Eq (28) in this equation, we obtain

$$\langle T_{\tau} \hat{j}_x^p(\tau_1) \hat{j}_x^p(\tau_2) \rangle = \sum_{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \delta_1 \delta_2 \sigma_1 \sigma_2} \delta_{x1}\delta_{x2}t_{\delta_1}t_{\delta_2} \frac{\delta G_{\sigma_2}(2', 2)}{\delta \phi_{\sigma_1}(1, 1')} \quad (64)$$

where we have used the notation $1 = (\mathbf{r}_1, \tau_1)$ and $1' = (\mathbf{r}_1 - \delta_1, \tau_1)$. Note that the first term on the right-hand side of Eq (28) does not contribute to the sum since $\langle j_x^p \rangle = 0$. Now, summing over spin indices and using spin rotational invariance, we obtain

$$\langle T_{\tau} \hat{j}_x^p(\tau_1) \hat{j}_x^p(\tau_2) \rangle = - \sum_{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \delta_1 \delta_2} \delta_{x1}\delta_{x2}t_{\delta_1}t_{\delta_2} \chi_{+}(2', 2, 1, 1'), \quad (65)$$

where we have used the definition Eq (40) for the generalized susceptibility χ_{+} .

The most general way of thinking about the last result is that it comes from a functional derivative of the current with respect to an applied vector potential representing the electric field. The remaining of the derivation, that we give in the rest of this subsection, is based on the idea that we should evaluate this functional derivative in a systematic way to obtain a conserving approximation, as shown by Baym⁵⁶. We will keep working with the source field ϕ_{σ} but it is useful to remember that within simple prefactors, it is equivalent to working with the vector potential as the source field.

The susceptibility χ_{+} is defined in terms of a functional derivative in Eq (40). That functional derivative leads to a Bethe-Salpeter like equation (36) that contains two different types of terms

$$\begin{aligned} \chi_{+}(1, 2|3, 4) = & -2G(1, 3)G(4, 2) \\ & - 2G(1, \bar{1}) \left(\frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{\sigma}(3, 4)} + \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{-\sigma}(3, 4)} \right) G(\bar{2}, 2) \end{aligned} \quad (66)$$

The product GG comes from the explicit dependence of G^{-1} on the source field while the last one comes from the implicit dependence of the self-energy on that source field. The product GG is what leads to the "bubble"

in standard conductivity calculations. The other term is the vertex correction.

Up to now, everything is exact. To work within TPSC, it suffices to use everywhere the results obtained at the second level of approximation, namely $G_\sigma^{(2)}$ and $\Sigma_\sigma^{(2)}$ since at the first level of approximation the conductivity is infinite. Our explicit formula for $\Sigma_\sigma^{(2)}$ Eq. (26) is a functional of $G_\sigma^{(1)}$. We can thus write

$$\frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}. \quad (67)$$

Expanding the sum over spin, using the chain rule, spin rotation invariance and the definition of χ_+ Eq. (40) we obtain

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{-\sigma}(3, 4)} = \\ -\frac{1}{2} \left(\frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) \chi_+^{(1)}(\bar{3}, \bar{4}|3, 4) \end{aligned} \quad (68)$$

where $\chi_+^{(1)}$ is computed with $G_\sigma^{(1)}$. Substituting in the exact expression for χ_+ Eq. (66), we find

$$\begin{aligned} \chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\ + G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2) \left(\frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) \\ \times \chi_+^{(1)}(\bar{3}, \bar{4}|3, 4). \end{aligned} \quad (69)$$

If $\Sigma_\sigma^{(2)}$ had been a functional of $G^{(2)}$ we would have had an infinite series to sum. Instead, here the series ends as we now show. First note that, from Eq.(41) and the approximation (52) for the charge vertex,

$$\begin{aligned} \chi_+^{(1)}(\bar{3}, \bar{4}|3, 4) = -2G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\ + G^{(1)}(\bar{3}, \bar{5})G^{(1)}(\bar{6}, \bar{4})\Gamma_{ch}^{(1)}(\bar{5}, \bar{6}, \bar{7}, \bar{8})\chi_+^{(1)}(\bar{7}, \bar{8}|3, 4) \\ = -2G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\ + U_{ch}G^{(1)}(\bar{3}, \bar{5})G^{(1)}(\bar{5}, \bar{4})\chi_+^{(1)}(\bar{5}, \bar{5}^+|3, 4). \end{aligned} \quad (70)$$

From this expression, only the first term has to be included in our calculation because the second term will not contribute to the $\mathbf{q} = 0$ *current-current* correlation function. This is because $\Gamma_{ch}^{(1)}$ is local in space and local vertex corrections do not contribute to the uniform conductivity. To see why, one can represent the correlation function Eq. (65) as a series of diagrams with current vertices at their ends and vertex functions inserted between them. Whenever a vertex function in a diagram does not depend on \mathbf{q} , a bubble is closed with the local vertex on one end and the current vertex on the other. Since a current vertex is an odd function in space and the product of the Green's function is even because the bubble does not carry any momentum, the integral vanishes.

Inserting the first term of $\chi_+^{(1)}$, Eq. (70), into $\chi_+^{(2)}$ Eq. (69), we obtain

$$\begin{aligned} \chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\ - 2G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2) \left(\frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) \\ \times G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}). \end{aligned} \quad (71)$$

The last step is in principle straightforward, but very tedious. We must obtain an expression for the functional derivatives in parenthesis in this expression. The self-energy Eq. (26) in real space is

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma^{(2)}(1, 2) = UG_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+)\delta(1 - 2) \\ + \frac{U}{8} [3U_{sp}\chi_{sp}(2, 1) + U_{ch}\chi_{ch}(2, 1)] G_\sigma^{(1)}(1, 2). \end{aligned} \quad (72)$$

so that

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_\sigma^{(2)}(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} = U\delta(1 - 2)\delta(1 - 3)\delta(1^+ - 4)\delta_{-\sigma, \sigma'} \\ + \frac{U}{8} [3U_{sp}\chi_{sp}(2, 1) + U_{ch}\chi_{ch}(2, 1)] \delta(1 - 3)\delta(2 - 4)\delta_{\sigma\sigma'} \\ + \frac{U}{8} G_\sigma^{(1)}(1, 2) \left[3U_{sp} \frac{\delta \chi_{sp}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} + U_{ch} \frac{\delta \chi_{ch}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} \right]. \end{aligned} \quad (73)$$

In this expression, the terms involving the functional derivatives of U_{sp} and U_{ch} have been omitted because they do not contribute to the conductivity. Fundamentally, what is needed is $\frac{\delta U_{sp/ch}}{\delta A_x}$, where A_x is the vector potential. Since U_{sp} and U_{ch} are local, this is the correlation function of a local operator, that is thus even under time reversal, and the current operator, that is odd. The $\mathbf{q} = 0$ component of this correlation function that enters the *current-current* correlation function, Eq.(62), therefore vanishes.

Now, we need an explicit expression for $\delta \chi_{ch/sp}(2, 1)/\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)$ to know the vertex correction Eq. (73) completely. Let us start with χ_{ch} . One can obtain an expression for this function by taking $2 = 1^+$ and $3 = 4^+$ in the expressions for $\chi_{+/-}$ Eq. (41). But this expression has been simplified using spin rotational invariance. If we separate the spin contributions, we have

$$\begin{aligned} \chi_{ch}(2, 1) = -G_\sigma(2, 1^+)G_\sigma(1, 2^+) - G_{-\sigma}(2, 1^+)G_{-\sigma}(1, 2^+) \\ + \frac{1}{2}U_{ch}G_\sigma(2, \bar{2}^+)G_\sigma(\bar{2}, 2^+)\chi_{ch}(\bar{2}, 1) \\ + \frac{1}{2}U_{ch}G_{-\sigma}(2, \bar{2}^+)G_{-\sigma}(\bar{2}, 2^+)\chi_{ch}(\bar{2}, 1) \end{aligned} \quad (74)$$

so that

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{ch}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)} = & -\delta(2-3)\delta(1^+-4)G_{\sigma'}(1,2^+) - G_{\sigma'}(2,1^+)\delta(1-3)\delta(2^+-4) \\
& + \frac{1}{2}U_{ch}\delta(2-3)G_{\sigma'}(4,2)\chi_{ch}(4,1) + \frac{1}{2}U_{ch}\delta(2-4)G_{\sigma'}(2,3)\chi_{ch}(3,1) \\
& + \frac{1}{2}U_{ch}G_{\sigma}(2,\bar{2}^+)G_{\sigma}(\bar{2},2^+)\frac{\delta\chi_{ch}(\bar{2},1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)} + \frac{1}{2}U_{ch}G_{-\sigma}(2,\bar{2}^+)G_{-\sigma}(\bar{2},2^+)\frac{\delta\chi_{ch}(\bar{2},1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)}, \quad (75)
\end{aligned}$$

where, again, the functional derivatives of U_{ch} have been omitted, for the same reason as in (73). Using again spin rotational invariance, this gives

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{ch}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)} = & -\delta(2-3)\delta(1^+-4)G(1,2^+) - G(2,1^+)\delta(1-3)\delta(2^+-4) \\
& + \frac{1}{2}U_{ch}\delta(2-3)G(4,2)\chi_{ch}(4,1) + \frac{1}{2}U_{ch}\delta(2-4)G(2,3)\chi_{ch}(3,1) + U_{ch}G(2,\bar{2}^+)G(\bar{2},2^+)\frac{\delta\chi_{ch}(\bar{2},1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)}. \quad (76)
\end{aligned}$$

By Fourier transforming this equation with respect to 2, we obtain an algebraic equation that is trivial to solve. Fourier transforming back the result, we obtain

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{ch}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)} = & \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2,3)G(4,3)\left[-\delta(1-4) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(4,1)\right] \\
& + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2,4)G(4,3)\left[-\delta(1-3) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(3,1)\right], \quad (77)
\end{aligned}$$

where

$$\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(1,2) = \frac{T}{N} \sum_q e^{iq \cdot (1-2)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q)}. \quad (78)$$

The expression for $\delta\chi_{sp}(2,1)/\delta G_{\sigma'}(3,4)$ is obtained by simply replacing U_{ch} by $-U_{sp}$ and χ_{ch} by χ_{sp} in the right-hand side of expression (77),

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)} = & \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,3)G(4,3)\left[-\delta(1-4) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(4,1)\right] \\
& + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,4)G(4,3)\left[-\delta(1-3) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(3,1)\right]. \quad (79)
\end{aligned}$$

Substituting Eqs. (77) and (79) in our expression for the vertex, Eq. (73), we obtain

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1,2)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} = & U\delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta_{-\sigma,\sigma'} + \frac{U}{8}[3U_{sp}\chi_{sp}(2,1) + U_{ch}\chi_{ch}(2,1)]\delta(1-3)\delta(2-4)\delta_{\sigma\sigma'} \\
& - \frac{U}{8}G^{(1)}(1,2)G^{(1)}(4,3)\left[3U_{sp}\left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,3)\left[\delta(1-4) + \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(4,1)\right] + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,4)\left[\delta(1-3) + \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(3,1)\right]\right)\right. \\
& \left.+ U_{ch}\left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2,3)\left[\delta(1-4) - \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(4,1)\right] + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2,4)\left[\delta(1-3) - \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(3,1)\right]\right)\right] \quad (80)
\end{aligned}$$

and therefore,

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\bar{1},\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(\bar{3},\bar{4})} + \frac{\delta\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\bar{1},\bar{2})}{\delta G_{-\sigma'}^{(1)}(\bar{3},\bar{4})} = & U\delta(\bar{1}-\bar{2})\delta(\bar{1}-\bar{3})\delta(\bar{1}^+-\bar{4}) + \frac{U}{8}[3U_{sp}\chi_{sp}(\bar{2},\bar{1}) + U_{ch}\chi_{ch}(\bar{2},\bar{1})]\delta(\bar{1}-\bar{3})\delta(\bar{2}-\bar{4}) \\
& - \frac{U}{4}G^{(1)}(\bar{1},\bar{2})G^{(1)}(\bar{4},\bar{3})\left[3U_{sp}\left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2},\bar{3})\left[\delta(\bar{1}-\bar{4}) + \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{4},\bar{1})\right] + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2},\bar{4})\left[\delta(\bar{1}-\bar{3}) + \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{3},\bar{1})\right]\right)\right. \\
& \left.+ U_{ch}\left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2},\bar{3})\left[\delta(\bar{1}-\bar{4}) - \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{4},\bar{1})\right] + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2},\bar{4})\left[\delta(\bar{1}-\bar{3}) - \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{3},\bar{1})\right]\right)\right] \quad (81)
\end{aligned}$$

We now have everything to write down an explicit form for the susceptibility $\chi_+^{(2)}$ in (71),

$$\begin{aligned} \chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = & -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) - 2UG^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{1}, 2)G^{(1)}(\bar{1}, 3)G^{(1)}(4, \bar{1}^+) \\ & - \frac{U}{4}G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)[3U_{sp}\chi_{sp}(\bar{2}, \bar{1}) + U_{ch}\chi_{ch}(\bar{2}, \bar{1})]G^{(1)}(\bar{1}, 3)G^{(1)}(4, \bar{2}) \\ & - \frac{U}{2}G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2})G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3})G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\ & \times \left[3U_{sp} \left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1}) \right] + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right. \\ & \left. + U_{ch} \left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{4}, \bar{1}) \right] + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right]. \quad (82) \end{aligned}$$

To evaluate the current-current correlation function entering the conductivity, it is clearly necessary to go to Fourier space. Inserting then this last result in Eq. (65) for the current-current correlation function and using

$$\delta_x t_\delta = \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \quad (83)$$

and

$$1 + \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(q) = \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q)}, \quad 1 - \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(q) = \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q)}, \quad (84)$$

we finally obtain for the Fourier-Matsubara transformed expression at $\mathbf{q} = 0$,

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(iq_n) = & \frac{-2T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(k) \right)^2 G^{(2)}(k)G^{(2)}(k + iq_n) \\ & - \frac{U}{4} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1 k_2} G^{(2)}(k_1)G^{(2)}(k_1 + iq_n)G^{(1)}(k_2)G^{(1)}(k_2 + iq_n) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(k_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(k_2) [3U_{sp}\chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch}\chi_{ch}(k_2 - k_1)] \\ & + \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^3 \sum_{k_1, k_2, q_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(k_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(k_2) G^{(2)}(k_1)G^{(2)}(k_1 + iq_n)G^{(1)}(k_2)G^{(1)}(k_2 + iq_n) \left[G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1) \right] \\ & \times G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q_1 + iq_n)} + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \quad (85) \end{aligned}$$

In this expression, we use the compact notation $k + iq_n = (\mathbf{k}, ik_n + iq_n)$. Note that the second term on the right-hand side of Eq. (82) does not contribute to $\chi_{J_x J_x}$ because it has a local vertex.

Eq. (85) is our final result for the current-current correlation function in Matsubara space, including both bubble and vertex corrections. It is useful for the intuition and to verify the Fourier transforms to represent it schematically, as we have done in Fig. 1. We stress that this representation is not the result of a perturbative calculation. It exists merely because we are working with Green's functions and response functions. This representation helps noticing that an analogy can be made between the different contributions to $\chi_{J_x J_x}$ and the diagrams considered in the theory of paraconductivity.⁶⁵ In

the latter theory, one considers the effect of the superconducting fluctuations on the conductivity of the normal state, while in our case, the bosons exchanged are spin and charge fluctuations. The diagram with a single boson propagator on the first line of Fig. 1 is the analog of the Maki-Thompson (MT) contribution,⁶⁶⁻⁶⁹ while the diagrams on the second and third lines are analogs of the Aslamazov-Larkin (AL) contributions.⁷⁰ However, it is important to note that, because our approach is not perturbative, some electron propagators are at the second level of approximation and some are at the first level, and the boson propagators are the susceptibilities computed with the renormalized spin and charge irreducible vertices.

In the system considered in this paper, the relevant

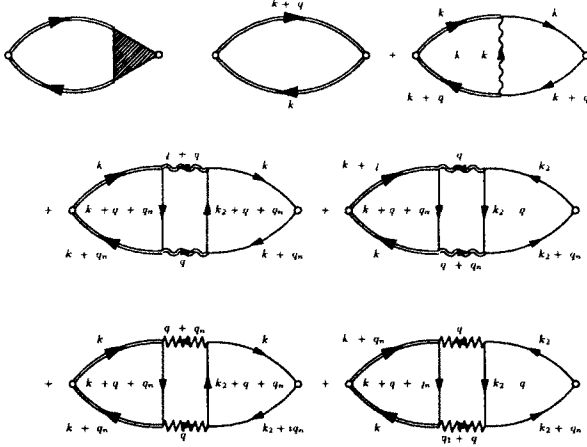


FIG 1 Schematic representation of the various terms in the *current-current* correlation function Eq (85). Simple fermion lines represent the Green's function $G^{(1)}$ (in practice it has the same form as the bare Green's function), double fermion lines are dressed Green's function $G^{(2)}$, the simple wiggly line in the last diagram on the first line is the function $[3U_{sp}\chi_{sp} + U_{ch}\chi_{ch}]$, the double wiggly lines in the third and fourth diagrams on the right-hand side are the function $1/(1 - U_{sp}\chi_0/2)$ and the zigzag lines in the last two diagrams are the function $1/(1 + U_{ch}\chi_0/2)$. Those diagrams serve only as a graphical representation of Eq (85), they are not obtained in a perturbative way.

collective modes are magnetic fluctuations with a wave vector close to $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. First, when those fluctuations become strong, they scatter quasiparticles, which has a dramatic effect on the single particle spectrum and therefore the conductivity obtained from the bubble alone. But the magnetic fluctuations also lead to important vertex corrections because they correlate the regions of the Fermi surface that are connected by wave vectors close to \mathbf{Q} . For the MT diagram in Fig 1, in the DC limit, the exchange of such a fluctuation between the particle and the hole created by the field causes the pair to be scattered from a region of the Fermi surface where it carries a positive current along the direction of the field, to a region where it carries a negative current. This correlation between currents flowing in opposite directions degrades the DC conductivity. In the case of the AL diagrams in Fig 1, a particle-hole pair creates another one via two magnetic fluctuations. If they have a large correlation length, this will tend to correlate currents on large distances. However, the particle-hole pair created by the fluctuations can carry a current that is either positive or negative. Keeping in mind that when quasiparticles create or absorb magnetic fluctuations their velocity along the direction of the field changes sign, one finds that the first diagram in the second line of Fig 1 correlates currents flowing in the same direction while the second diagram correlates currents in opposite directions. In addition, the former contribution is large if the single particle spectral density is large below the Fermi level in regions

connected by wave vectors around \mathbf{Q} , while the latter is large if the spectral density is large above the Fermi level. When both processes are summed up, there will therefore be a net effect on the conductivity only if there is an asymmetry in the relevant parts of the density of states.

E. Calculation algorithms

Let us recall that we have used the short-hand notation $k = (\mathbf{k}, i k_n)$, with $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, in the general expression for the current-current correlation function Eq (85). Thus, each sum over a tri-vector k is over the two-dimensional Brillouin zone and over Matsubara frequencies. The second and third sums are therefore six- and nine-dimensional, respectively. The six-dimensional sum would be extremely long to do in a direct way for relevant system sizes and temperatures. For example, for a finite system of 512×512 sites with about 4000 frequencies, which would allow to go down to temperatures about $T = 0.01t$ (without finite size effects), it would take of the order of thirty years to compute one frequency $i q_n$, if 10^9 terms are summed per second. Of course, this is using pure brute force, when all wave vectors and frequencies are summed, which is not necessary in practice. In the case of the nine-dimensional sum, it would take about 40 billion years to compute a single frequency in the same conditions. If one was to keep the direct summation approach, but optimizing the procedure by using a very efficient adaptive scheme, it would still be extremely hard to do the six-dimensional sum to obtain, for example, 100 frequencies in a reasonable time, namely, of the order of a few days. In the case of the nine-dimensional sum, it is obviously impossible to do this way.

One thus has to resort to a numerical approach completely different from direct summation to succeed in calculating all the terms of Eq (85) for a useful number of frequencies $i q_n$. The main tool that we use to make this calculation possible is the *fast Fourier transform*, which changes the scaling of Fourier transforms from N^2 to $N \log N$. But other mathematical and numerical tricks are also necessary to make the calculation both fast and precise. Precision is critical here since we have to numerically perform the analytical continuation of the computed Matsubara current-current correlation function and numerical analytical continuation is inherently an ill-conditioned problem. For this analytical continuation procedure, that produces the real frequency optical conductivity from the Matsubara current-current correlation function, a *maximum entropy algorithm* was also developed to maximize the accuracy of the result. The calculation algorithms for $\chi_{j_x j_x}(i q_n)$ and our analytical continuation algorithm are summarized in the next two subsections and detailed in appendices C to F.

1. Fast Fourier transforms, cubic splines and asymptotic expansions

The key property that allows us to compute Eq.(85) is that some of its sums are convolutions. Since the convolution of two functions can be written as the Fourier transform of the product of the of their Fourier transforms, we can use fast Fourier transforms (FFT) to do those convolutions in a very efficient way. However, FFTs are discrete transform, while some of the transforms we have to do are continuous ones. In the case of the spatial Fourier transforms, we can use a finite system with periodic boundary conditions, so that all the transforms are discrete and FFTs can be used directly. Since we work at finite temperature in two dimensions, all correlation lengths are finite and we can use a system large enough to reach interesting regimes. The system size we use in this work is 512×512 and the lowest temperature we reach is $0.008t$, which corresponds to $32K$ if $t = 0.35eV$. At this temperature, the thermal De Broglie wavelength is about 100 in lattice units, so that no finite size effect are seen unless the magnetic correlation length becomes large.

In the case of imaginary time, if it is discretized, then the Fourier transform will be periodic in Matsubara frequencies, which is unphysical. In fact, the lowest frequencies will be acceptable, though not very precise, but the precision will decrease rapidly with increasing frequency, so that the high frequencies will be completely wrong. To overcome this problem, we use a cubic spline to interpolate the function between the discrete imaginary time points and we do a continuous Fourier transform on the spline. This technique has already been used in the context of dynamical mean field theory calculations.⁷¹ However, to our knowledge, it has not been pointed out that, because the spline is only twice continuously differentiable, after integrating by parts three times the Fourier integral, we are left with an expression containing a discrete Fourier transform (DFT) that can be done with an FFT. Using the more general formula derived in appendix E, the final formula for the Fourier transform of the cubic spline of an imaginary time function $g(\tau)$ is

$$\begin{aligned}
 g(i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau g(\tau) e^{i\omega_n \tau} \\
 &\approx \sum_{j=1}^N \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} d\tau S_j(\tau) e^{i\omega_n \tau} \\
 &= -\frac{g(0) - e^{i\omega_n \beta} g(\beta)}{i\omega_n} + \frac{S'_1(0) - e^{i\omega_n \beta} S'_N(\beta)}{(i\omega_n)^2} \\
 &\quad - \frac{S''_1(0) - e^{i\omega_n \beta} S''_N(\beta)}{(i\omega_n)^3} \\
 &\quad + \frac{1 - e^{i\omega_n \Delta\tau}}{(i\omega_n)^4} \sum_{j=0}^{N-1} S_{j+1}^{(3)} e^{i\omega_n \tau_j},
 \end{aligned} \tag{86}$$

where N is the number of intervals in the discretized imaginary time between 0 and β , $\Delta\tau$ is the size of an interval, $S_j(\tau)$ is the cubic polynomial in the j^{th} interval, $S'_j(\tau)$, $S''_j(\tau)$ and $S_j^{(3)}$ are, respectively, the first, second and the third derivative of $S_j(\tau)$. If g is a fermionic function, $e^{i\omega_n \beta} = -1$, while $e^{i\omega_n \beta} = 1$ if it is bosonic.

When using formula (86), we work explicitly with the high frequency expansion up to the $1/(i\omega_n)^3$ term, which can be very useful, as will be explained shortly. Up to which term this expansion will be exact depends on how the spline is defined. As shown in appendix E, there are two conditions defining the spline that can be chosen depending on the information available. If the derivatives at the boundaries $g'(0)$ and $g'(\beta)$ are known, one can fix $S'_1(0)$ and $S'_N(\beta)$ to those values. That is what we do in our calculations. Otherwise, one has to use exact results for the second and third high frequency coefficients of g , i.e., the second and third moments of its spectral function. Another important point about Eq.(86) is that the last term containing the DFT only contributes to the low frequencies because of its factor $1/(i\omega_n)^4$, therefore the error at high frequency that comes from the discretization of τ rapidly vanishes.

Given the above considerations, it should now be clear that we can compute convolutions both in wave vector and Matsubara frequency using fast Fourier transforms. Before the calculation of $\chi_{j_x j_x}$, Eq.(85), this technique is used to compute the Lindhard function Eq.(22) and then, the self-energy Eq.(26). The computation of those functions with FFT is relatively straightforward to implement, although some care must be taken in the definition of the splines. Those details are given in appendices C 1 and C 2. In the case of Eq.(85), we only seek the $\mathbf{q} = 0$ component of $\chi_{j_x j_x}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ so that, in each term, the last sum over the Brillouin zone to be performed is a simple sum and FFTs are not useful there. Regarding the other sums it is not obvious which one can be put in the form of a convolution, except for the bubble which has the same form as the Lindhard function. In the case of the second term of Eq.(85), represented by the second diagram (Maki-Thompson) on the right-hand side of Fig.1, it is possible to put all those sums in the form of convolution, and thus to compute all of them with FFTs. This means that, all the external frequencies $i\omega_n$ can be obtained at once, when the last FFT is performed. The scaling of this calculation with system size and inverse temperature is thus the same as for the bubble. That is not the case however of the last term of Eq.(85), represented by the last four (Aslamazov-Larkin) diagrams in Fig.1. For this term, each frequency has to be calculated separately and it is the calculation time of only one frequency that has the same scaling as the bubble. Calculating this term for 100 values of $i\omega_n$ therefore takes hundreds of times the calculation time of all frequencies of the bubble. The calculation of the bubble is nevertheless very quick, of the order of a few minutes at most for our 512×512 system at low temperature.

Note however that a quite large amount of analytical

work is needed to put the last two terms of Eq.(85) in a form suitable for computation with FFTs. This work involves some transformations and a certain number of sums over Matsubara frequencies must be performed exactly. The details of those transformations and analytical calculations are given in appendix C 3.

Still, it is impossible to calculate the third term of Eq.(85) for thousands of frequencies, namely the number of frequencies below the cutoff used in the calculation. Therefore, to reduce the number of frequencies to be calculated, we have used a non-uniform Matsubara frequency grid in which the frequency spacing increases with frequency magnitude. We give the definition of this grid in appendix D. We have verified that the function $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ evaluated on this grid has enough information for the analytically continued conductivity $\text{Re } \sigma(\omega)$ to be converged.

Using the formula (86) for our functions in Matsubara frequencies has the advantage that we always have at our disposal their high frequency expansion. Thus if we want the inverse Fourier transform (from Matsubara frequencies to imaginary time) of a more complex function, for example the product of two functions of the form (86), we can always use the asymptotic form to perform the sum over Matsubara frequencies up to infinity using contour integrals in the complex plane and the residue theorem. In a lot of cases, this is necessary since the sum does not converge otherwise. As will be explained in the next subsection, precision is important in our calculations since we have to extract $\text{Re } \sigma(\omega)$ from the Matsubara function $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ and analytical continuation is a very ill-conditioned problem.

Finally, as one will notice from appendix C 3, the calculation of Eq.(85), especially the second and third terms, contains many steps. The debugging part of the work is therefore considerable. To make sure the formula (85) is implemented correctly, we have compared its brute force implementation, term by term, with its fast one given in appendix C 3. Here, brute force means that it is coded exactly as written in (85), with one exception that will be explained shortly. Therefore, we compare the results of two calculations that are completely different numerically, but mathematically equivalent. Of course, those verifications can only be done for very small system at very high temperature, since otherwise the brute force calculation is impossible to do in a reasonable time. But even then, the third term of (85) takes too much time to compute with brute force. In that case, the procedure is to first verify that the sum over k_2 for some random values of q_n and q_1 gives the same result with the two implementations and then to replace this sum in the brute force version by its fast implementation. After that step we compare this modified brute force implementation with the fast implementation of the whole third term.

2. Analytical continuation

Expression (85) gives the *current-current* correlation function in Matsubara frequencies while we need it in real frequency to compute the conductivity from Eq.(18) or Eq.(19). Thus we need a reliable analytical continuation method. To do so, we use a maximum entropy approach. This kind of analytical continuation procedure is often used to extract real frequency results from imaginary time quantum Monte Carlo data using some information known *a priori* such as sum rules and a default model which contains some known properties of the expected function⁷². This information is included in the algorithm in the form of constraints or in the entropy definition. This kind of approach is well suited for quantum Monte Carlo since the results are usually in discretized imaginary time and the amount of noise can be important, so that any additional information is welcome. In our case, the original data is in Matsubara frequencies and the noise level is much lower since it comes only from finite precision rounding errors accumulating throughout the calculation. However, our calculation of $\chi_{j_x j_x}$ contains many steps so that the final result may have an amount of noise such that Padé approximants will not work. Those approximants are very sensitive to noise⁷³ and their reliability is not very good except at very low temperature. In any case, we have noticed that they give unstable results as a function of temperature for our data while our maximum entropy procedure is in general stable.

We give here the main features of our approach. The details are given in appendix F. As usual we minimize the function $\chi^2 - \alpha S$, where S is the entropy, α , a weighting parameter for S while χ^2 is the quadratic error between $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ and the quantity $\bar{\chi}_{j_j}(iq_n)$ computed from the spectral representation of $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ with a trial real frequency conductivity $\text{Re } \sigma(\omega)$. First, an accurate numerical integration scheme has to be chosen to compute $\bar{\chi}_{j_j}(iq_n)$ from $\text{Re } \sigma(\omega)$ known on a fixed discrete grid in real frequency ω . We use a cubic spline to approximate $\text{Re } \sigma(\omega)$. Since we work in Matsubara frequencies instead of imaginary time, the spectral form is simple and can be integrated analytically if $\text{Re } \sigma(\omega)$ is approximated by a piecewise cubic polynomial function. Also, because we want to integrate $\text{Re } \sigma(\omega)$ in the interval $[0, \infty]$, we integrate the low frequency part with respect to ω and the high frequency part with respect to $1/\omega$. To do so, we use a spline cubic in ω for low frequencies and cubic in $1/\omega$ for high frequencies. As for the choice of grid, we take it to be uniform in ω for the low frequency part and uniform in $1/\omega$ for high frequencies. This choice of grid ensures that the matrix for the spline linear system is well conditioned, and keeps the number of values $\text{Re } \sigma(\omega_j)$ reasonable, so that the minimization procedure is not too heavy. The integration using the spline turns out to be very accurate compared to a simple piecewise linear approximation. In our tests with a well defined analytical form for $\text{Re } \sigma(\omega)$ for which $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$ could be

computed very accurately with an adaptive integration routine. The relative precision was typically five orders of magnitude smaller than the spline than the piecewise linear approximation. The reason why we have to use a very accurate integration method is that the relative difference between $\bar{\chi}_{JJ}(iq_n)$ and $\chi_{JJx}(iq_n)$ has to be very small, typically $< 10^{-5}$ in our calculation, for $\text{Re } \sigma(\omega)$ to be converged in the optimization procedure. The precision of the numerical integral for a given $\text{Re } \sigma(\omega)$ has clearly to be smaller than this required relative error on $\bar{\chi}_{JJ}(iq_n)$ for the result to be reliable.

The fact that the spline is integrated analytically has the great advantage that low temperatures are not more difficult to handle, while it is the case with standard numerical integration because the integrand becomes sharper as temperature decreases. Note that all those precision issues are important if one is interested in quantitative results. For instance, we want to obtain the resistivity as a function of temperature, but since the results at different temperatures are numerically completely independent, the quantitative aspect becomes crucial. If one is only interested in the shape of $\text{Re } \sigma(\omega)$ at a given temperature, simpler and cruder approximations can be sufficient.

III. NUMERICAL RESULTS

Before we show the results of this work, let us recall some important former results of TPSC. First, the theory respects the Mermin-Wagner theorem, so that no phase transition occur at finite temperature. However, with proper values of U and hopping parameters, antiferromagnetic correlations are present up to very high temperatures around half-filling. For example, with $U = 6t$ and nearest neighbor hopping only, for dopings smaller than $p_c = 0.205$ a crossover to a renormalized classical regime appears. This regime appears when $k_B T \gg \hbar \omega_{sp}$, where ω_{sp} is the characteristic frequency of the antiferromagnetic fluctuations, i.e., the frequency at which the imaginary part of spin correlation function $\chi''_{sp}(\omega)$ is maximum. In this regime, the antiferromagnetic correlation length has the form $\xi_{sp} \propto \exp(C/T)$, where C has a very weak temperature dependence. Therefore, at a certain temperature T^* , ξ_{sp} becomes larger than the single-particle thermal De Broglie wavelength $\xi_{th} = \hbar v_F / (\pi k_B T)$. When this happens, the parts of the Fermi surface that are connected by the antiferromagnetic wave vector, called the hot spots, are strongly scattered by the magnetic fluctuations and eventually destroyed, producing a gap in those regions of the Brillouin zone.^{34,59} However, before the correlation length becomes infinite, which is the case only at $T = 0$ in two dimensions, there is still spectral weight at the Fermi level and thus no real gap exists, but what is observed instead is a pseudogap, namely, a depression of the density of states at the Fermi level. Therefore, the crossover temperature to the renormalized classical regime T^* can also be called

a pseudogap temperature. When $T = 0$, long-range spin-density wave (SDW) order exists for $p < p_c$ and thus p_c is a quantum critical point (QCP). Depending on band parameters and doping, this SDW state can be commensurate or incommensurate. Usually, it is commensurate close to half-filling and a transition to incommensurate appears at a certain doping.⁷⁴

Benchmarks of TPSC results were made against quantum Monte Carlo (QMC) results for quantities such as the spin- and charge structure factors,³³ the quasi-particle renormalization factor and the imaginary time Green's function,⁵⁹ the finite frequency spin susceptibility, the double occupancy and the one-particle occupation number,³⁴ and finally, the one-particle spectral weight⁴⁰. Those benchmarks were made in the weak to intermediate coupling regime for a large range of doping around half-filling and for temperatures where no finite size effect are seen in the QMC results and, at finite doping, when the sign problem is not too strong. In general, a good quantitative agreement is obtained for all quantities at a coupling $U = 4t$. For some quantities such as the spin structure factor, the agreement is almost perfect above T^* for couplings up to $U = 8t$. Since TPSC has a mean field nature⁷⁵ coming from the ansatz Eq.(49), it slightly overestimates T^* (see Fig. 7 of ref. 34), but the qualitative behavior just below T^* , when the spin correlation length grows exponentially, is still very well reproduced. The spectral weight at half-filling in this regime is also very well reproduced by TPSC.⁴⁰ This is the regime where precursors of the antiferromagnetic bands are formed and a pseudogap appears in the spectral weight.

The results we present in this section are for the one-band Hubbard model with nearest-neighbor hopping only. All numerical examples are for $U = 6t$ and various dopings and temperature. We begin by showing the accuracy with which the f -sum rule is satisfied. We then give a few typical examples of the frequency dependent conductivity. The last subsection will focus on the temperature dependent resistivity for various dopings.

A. f -sum-rule

Although our expression for the conductivity Eq. (85) was obtained from functional derivative methods that lead to results that satisfy conservation laws,⁵⁶ usually this method is applied to perturbative one-particle self-consistent schemes. In TPSC all the functional dependence on vector potential is in $G^{(1)}$. One may question whether this preserves conservation laws. The full Ward identity is derived in Appendix B where one also finds comments on why it cannot be used to find the vertex corrections in the limiting case we are interested in. Given the difficulty of computing the current-current correlation function alone for only the wave vector $\mathbf{q} = 0$, it will be clear why the full Ward identity cannot be verified. As a test of particle conservation, we focus instead

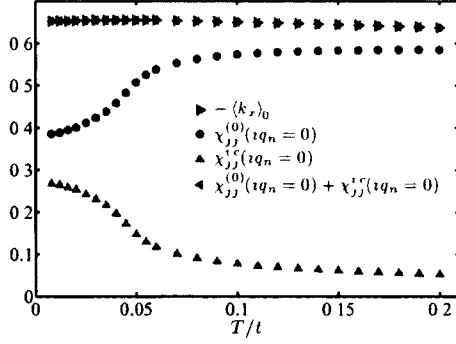


FIG. 2. Contributions to the zero Matsubara frequency value of the *current-current* correlation function compared to the sum-rule value $-\langle k_x \rangle$ for $p = 0.17$.

on how accurately the f -sum rule, Eq.(A19) derived in Appendix A,

$$\chi_{J_x J_x}(iq_n = 0) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad (87)$$

is satisfied numerically. In this equation, the occupation probability $\langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ is computed with $G^{(2)}$, while the left-hand side is the zero-Matsubara frequency *current-current* correlation function $\chi_{J_x J_x}$, Eq.(85), obtained with the functional derivative approach that gives us $\partial \Sigma^{(2)} / \partial G^{(1)}$ as irreducible vertex.

Typically, using $500t$ as the cutoff Matsubara frequency, i.e. about 60 times the bandwidth, the above equation is satisfied to a relative accuracy of 10^{-7} . By increasing the cutoff, the accuracy can be increased at will. We have reached an accuracy of 10^{-10} . The separate contributions of the different terms of expression (85), also represented schematically in Fig.1, are shown in Fig.2 as a function of temperature for 17% doping, i.e. on the left side of the quantum critical point. As one would expect, the bubble contribution is dominant at high temperature, although the first vertex correction is not negligible. At low temperature, in the renormalized classical regime, the two terms give comparable contributions. The contribution of the third term in Eq.(85), the Aslamazov-Larkin-like diagrams in Fig.1, vanishes at all temperatures. As will be seen in the next subsections, despite this vanishing contribution of this term to $\chi_{J_x J_x}(iq_n = 0)$, i.e. to the integral of the real part of the conductivity, this term contributes in a non-trivial way both to the DC and the finite frequency conductivity.

B. Optical conductivity

The optical conductivity and the effect of the vertex corrections are different depending on which side of the quantum critical point the system is and on the temperature. On the left-hand side of the critical point,

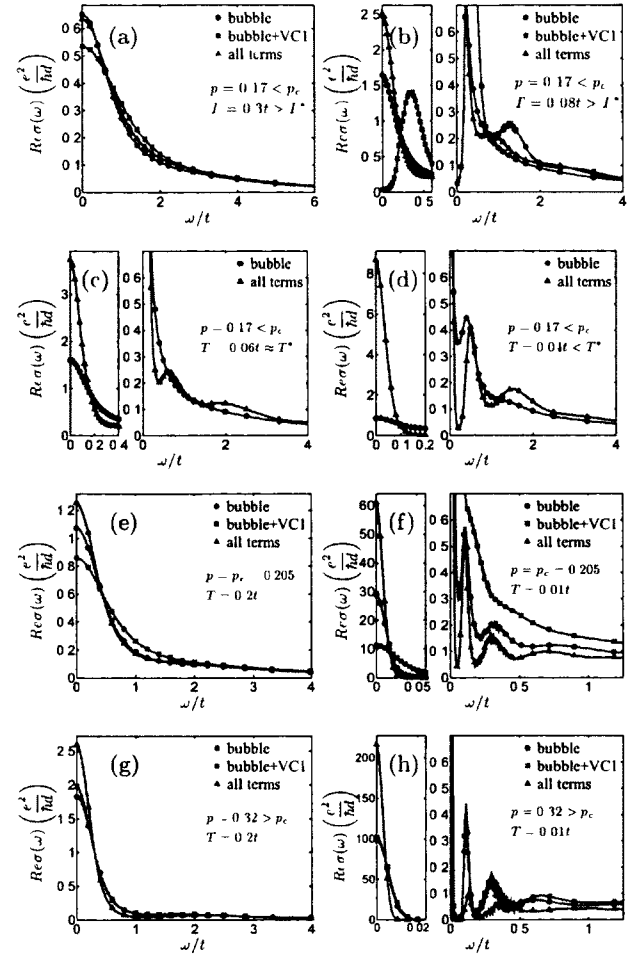


FIG. 3. Optical conductivity with and without vertex corrections at different dopings and temperatures. From (a) to (d) the doping is $p = 0.17 < p_c$ and the temperatures are (a) $T = 0.3t > T^*$, (b) $T = 0.08t > T^*$, (c) $T = 0.06 \approx T^*$ and (d) $T = 0.04t < T^*$. The other dopings are $p = 0.205 = p_c$ at temperatures (e) $T = 0.2t$ and (f) $T = 0.01t$ and $p = 0.32 > p_c$ at (g) $T = 0.2t$ and (h) $T = 0.2t$. All panels on the right-hand side contain a blow up of the low-frequency region of the rightmost plot. The symbols are only shown for a small fraction of the total number of points in the grids.

the conductivity changes qualitatively as the temperature approaches the crossover temperature to the renormalized classical regime T^* . Here T^* is defined as the temperature at which $\xi_{sp} = \xi_{th}$. As shown in Fig.3(a), at high temperature it has a Lorentzian-like shape at low frequency, whether we look at the bubble alone, the bubble with the first vertex correction or with both vertex corrections. In this region of the phase diagram, the low frequency conductivity is smaller if the vertex corrections are included. Then, as seen in the left part of Fig.3(b), as T is lowered toward T^* but still above it, the effect of the first vertex correction is to strongly decrease the

low frequency conductivity while the second correction does not just compensate this effect, but make the total even higher than the bubble alone. At higher frequencies, in the right part of Fig 3(b), a hump, not present without vertex corrections, appears in the total conductivity. Note that at this temperature the spin fluctuation frequency ω_{sp} is about $T/2$. When T is around T^* , in Fig 3(c), the hump is more pronounced and finally when $T < T^*$, in Fig 3(d), it becomes a very distinct peak. At this temperature, a hump similar to the one seen with vertex corrections at higher temperature appears in the bubble term alone. At this temperature, $T \approx 600\omega_{sp}$ and $\xi_{sp} = 147 \approx 6\xi_{th}$. If we were to compare our result to experiments, assuming an energy scale $t = 350\text{meV}$, the hump seen around $0.5t$ would correspond to the feature observed in the mid-infrared frequency range in the optical conductivity of electron-doped cuprates^{76,77}. Note that another clear hump appears in the conductivity with vertex corrections in Fig 3(d). At this doping and temperature, the spin fluctuations are incommensurate, hence their effect on the spectral weight at finite energy can be quite complex. This additional structure in the conductivity may be a consequence of this incommensurability.

At the critical doping, Figs 3(e) and 3(f), the low frequency conductivity is lower than the bubble result when only the first vertex correction is taken into account, while it is higher with both corrections. This effect is much more pronounced at low temperature in Fig 3(f). New secondary peaks also appear at low temperature. Those peaks are at frequencies considerably smaller than the peak seen at $p = 0.17$ below T^* and, as will be clear from the DC resistivity results in the next subsection, there is no pseudogap regime at this doping. Those peaks may nevertheless be caused by correlations that are present far beyond the critical doping, at least at finite temperature. The effect of those correlations are also clear in the resistivity results in the following subsection.

Finally, at a doping higher than the critical doping, in Figs 3(g) and 3(h), the conductivity with the first vertex correction can be almost the same as the bubble result at low frequency both at high and low temperature, although this correction does not vanish in Matsubara frequency (at $T = 0.01t$, $\chi_{j_x j_x}^{vc1}(0)$ is about 7% of $\chi_{j_x j_x}^{(0)}(0)$ and $\chi_{j_x j_x}^{vc1}(i2\pi T)$ is about 14% of $\chi_{j_x j_x}^{(0)}(i2\pi T)$). Adding the other correction makes the low frequency conductivity increase substantially. However, while the finite frequency conductivity stays finite when the doping is closer to p_c or smaller, at low temperature, in Fig 3(h), it vanishes completely just after the main low frequency peak when both vertex corrections are included. This peak is also sharper and higher at high doping (not shown). As will be confirmed in the next subsection this means that the system becomes closer to a Fermi liquid, although it has not yet reached this regime at this doping. When it does, the DC conductivity will be inversely proportional to T^2 at low temperature so that, to conserve the weight which is roughly constant with respect to temperature,

i.e. to respect the f -sum-rule, the width has to be proportional to T^2 . At zero temperature, since there is no impurity scattering in our model, the low frequency part becomes a delta function. Since the low frequency peak contains only a part of the weight, there must be an absorption band at finite frequency, as observed on the right part of Fig 3(h), which appears to be decoupled from the low frequency part by the region of zero conductivity.

The frequency region where the effect of vertex corrections is important becomes smaller as the doping increases. For $p = 0.17$, the difference between the different results vanishes around $\omega = 4t$, at the critical point, this happens around $\omega = 2t$ and at $p = 0.32$, around $\omega = 1.5t$.

As the doping increases, the conductivity at low temperature becomes extremely sharp and it becomes very hard to do the maximum entropy analytical continuation. That is because a very fine grid must be used at low frequency, while one still needs a cutoff larger than the bandwidth. This makes the number of points in the real frequency grid explode, as well as the time for the optimization process.

C. DC resistivity as a function of temperature and doping close to the quantum critical point

Figure 4 shows five interesting doping regimes for the DC resistivity. The left vertical axis is in units of the Ioffe-Regel maximum metallic resistivity. The right vertical axis translates the result in $\mu\Omega\text{cm}$ by taking $d = 5\text{\AA}$ as the interplane lattice constant. For the temperature scale, we use $t = 350\text{meV}$. The resistivity without vertex corrections (bubble) appears as red circles, with the first correction, namely the second term in expression (85) or the Maki-Thompson-like diagram in figure 1, in purple squares (bubble+VC1) and the total resistivity appears as blue triangles. The insets of the last three figures display the low temperature behavior. The position of each doping is indicated by an arrow for each figure on a schematic “phase diagrams” with the quantum critical point and the crossover line.

At the smallest doping, $p = 0.15$ in Fig 4(a), one observes at high temperature the expected Ioffe-Regel maximum metallic resistivity saturation. The value is about $2\hbar d/e^2$. The resistivity is higher when vertex corrections are included at high temperature. Without vertex corrections, it increases with decreasing temperature below the crossover temperature to the renormalized classical regime T^* , which is about 400K ($0.1t$) at this doping. The effect of vertex corrections is dramatic at low temperature, essentially changing the resistivity from insulating to metallic. An important point is that this effect can only be obtained when both corrections are included. When only the first correction is included, the scattering effect of magnetic correlations is largely overestimated and the resistive behavior thus amplified.

At $p = 0.17$, closer to the quantum critical point Fig 4(b) exhibits essentially the same behavior except that

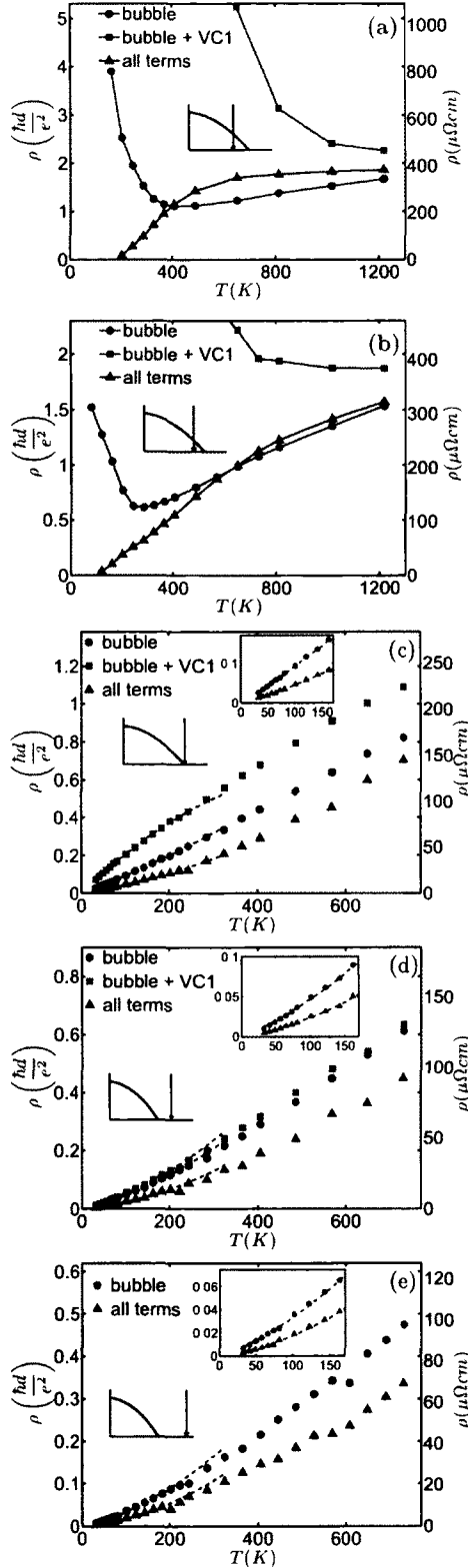


FIG. 4. Resistivity as a function of temperature for a) $p = 0.15$ b) $p = 0.17$ c) $p = 0.205$ (critical doping) d) $p = 0.26$ and e) $p = 0.32$. Dashed lines are the results of fits to $AT + BT^2$.

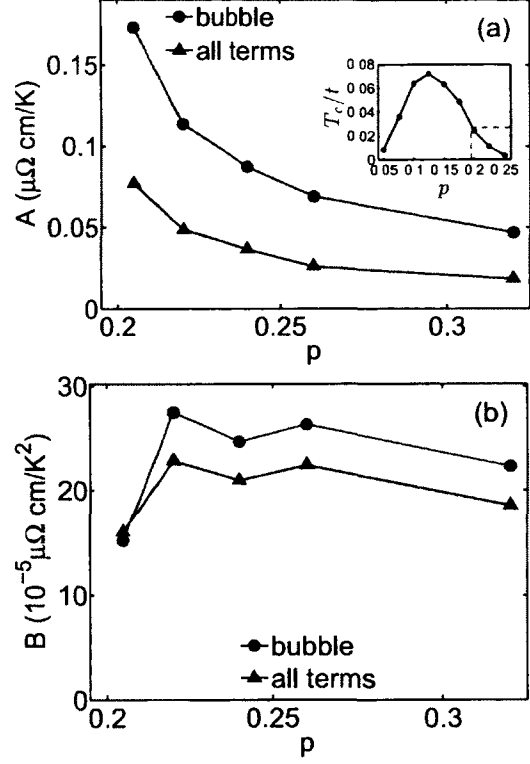


FIG. 5. Coefficients a) A and b) B in the fit of the form $AT + BT^2$ to the resistivity, as a function of doping, starting at the QCP. The inset in (a) shows the superconducting transition temperature as a function of doping estimated in TPSC, from Ref. 79. The doping region relevant for our fits is indicated with dashed lines in this inset.

given the overall smaller resistivity, the saturation at high temperature occurs beyond the range displayed.

At the quantum critical point, $p = 0.205$, one observes in Fig. 4(c) that, without vertex corrections, the resistivity is quite linear at low temperature, as found previously in spin fluctuation theories.^{21,78} When all the corrections are included, the most obvious effect is that the resistivity decreases at all temperatures. The linear behavior remains, at low temperature, but the vertex corrections tend to reduce the linear contribution and a T^2 behavior appears at a lower temperature than without vertex corrections. Note that, with only the first correction, there is a change in curvature. Also, the resistivity is larger than the bubble result at all temperatures instead of smaller as found when all vertex corrections are included.

As the doping becomes larger than the quantum critical doping, figures 4(d) and 4(e) show that a linear T behavior is still present at the lowest temperatures, but gradually disappears as the doping increases and the Fermi liquid-like T^2 behavior becomes dominant. The resistivity with the first vertex correction only is omitted in figure 4(e) because it is almost equal to the bubble result at all temperatures.

The result of fits of the temperature dependence of the resistivity to the functional form $AT + BT^2$ over the range $0.008t < T < 0.05t$ ($30K < T < 200K$) is illustrated in Figs. 5a and 5b. Those fits were done using two other resistivity curves in addition to those shown in figure 4, namely, at $p = 0.22$ and $p = 0.24$. The linear coefficient A decreases as one moves away from the quantum critical point. This decrease is correlated with the superconducting transition temperature, shown in the inset, estimated from calculations of the $d_{x^2-y^2}$ -wave susceptibility with TPSC⁷⁹. As for the coefficient B , it seems to have a rapid increase as we move away from the quantum critical point (QCP) and then to remain roughly constant as the doping increases. Note however that this coefficient is hard to obtain precisely close to the QCP. For example, if we change the number of points used in the fit, the value of B in this doping region can change by about 20%. This is because at low temperature, the region of interest here, the quadratic term has a very small contribution compared to the linear term close to the QCP. Also, there is always some noise in the resistivity, a consequence of the fact that those results are obtained by analytical continuation of Matsubara response functions, a procedure very sensitive to finite precision noise in these response functions. Therefore, the value of B for the two smallest dopings in figure 5(b) are rough estimations. However, as the doping increases, the quadratic contribution becomes more important and thus B is more precisely defined.

IV DISCUSSION

Based purely on our numerical results, with the Green's function at the second level of approximation and the irreducible vertex generated from the corresponding self-energy, we would have strong reasons to suggest that the f -sum rule is satisfied exactly in our approach. At all dopings and temperatures, that sum rule is satisfied with very high accuracy and the precision increases with the cutoff Matsubara frequency. Since the f -sum rule is a consequence of particle conservation (see appendix A), this means that our approach is consistent with particle number conservation. This result is a consequence of our use of functional derivatives to calculate the Green's function and correlation functions, as in conserving approximations⁵⁶. However, unlike in those approaches, there is no self-consistency at the one particle level, i.e., our self-energy $\Sigma^{(2)}$ is calculated with $G^{(1)}$ and not $G^{(2)}$. Thus one-particle self-consistency is not necessary to ensure particle conservation.

Starting with the self-energy at the second level of approximation, (72) the only non-straightforward part of the derivation is the neglect of the functional derivatives of the irreducible vertices U_{sp} and U_{ch} in the derivative of $\Sigma^{(2)}$ with respect to the field, or with respect to $G^{(1)}$. However, as was explained in subsection IID, following equation (73), the vanishing of those contributions to the conductivity is exact. Therefore, starting from the ap-

proximation that the spin and charge irreducible vertices Γ_{sp} and Γ_{ch} are local, Eqs. (51) and (52), the rest of the calculation is exact.

The saturation of the resistivity to the Ioffe-Regel maximum value at high temperature is a general constraint, thus time based on general physical considerations, that is satisfied by our approach. At high doping the Fermi-liquid T^2 resistivity is also recovered, as expected.

From the fact that the first vertex correction—the Maki-Thompson-like diagram in Fig. 1, is sufficient to respect the sum rule, one would be tempted to assume that the other type of vertex corrections will not contribute, as was done in previous calculations²⁷. It is clear from our results that this is not the case. In the pseudogap regime, the Aslamazov-Larkin-like contribution has a drastic effect on the DC resistivity, making the system metallic instead of insulating. If only the first correction is included, we would wrongly assume that the system is even more insulating than without any correction. On the right-hand side of the quantum critical point it is also very important to include both vertex corrections since their total effect is to reduce the resistivity, while it would increase, for a large range of doping, if only the first correction was taken into account. Also, when both corrections are included, the T^2 Fermi liquid resistivity is recovered at a lower doping. The importance of including both corrections is also very clear in the optical conductivity, especially on the left of the quantum critical point, where the result is qualitatively very different with only the first vertex correction.

One may ask whether it is enough to include only those two vertex corrections. To answer that question we recall that our expression of the *current-current* response function (85) is not derived perturbatively, but using functional derivatives. Since the calculation of $\chi_{J_x J_x}$ is exact starting from the TPSC ansatz (49) and the approximation (52), as long as TPSC is valid, all the terms needed are the ones that we have used. The region of the phase diagram where TPSC breaks down is deep in the pseudogap regime, when some parts of the Fermi surface are destroyed and thus, the one-particle spectrum is dramatically different from the non-interacting one. Therefore in this regime, the TPSC results should be regarded as more qualitative than quantitative.

Since we have not used realistic band parameters, we cannot directly compare our results with any real material. However, some tendencies can help us understand experiments and provide some hints on what what would be interesting to investigate using more realistic band structure.

First, there is a pseudogap in TPSC. For electron-doped cuprates, it was shown that the pseudogap has properties predicted by TPSC, namely it appears when the antiferromagnetic correlation length becomes larger than the single particle De Broglie wavelength, or the mean free path⁵². The hump around $\omega = 0.5t$, seen in figure 3(b), (c) and (d), thus corresponds to the analogous feature seen, for example, in $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ in

the mid-infrared energy range.^{76,77} If we use $t = 0.35\text{eV}$, the location in energy of this structure is also in the correct energy range. Those optical conductivity results and previous comparison of TPSC spectral weights with photoemission experiments on electron-doped cuprates add to the evidence that those materials are well described by the accurate solutions of the Hubbard model provided by the TPSC approach at intermediate coupling.^{41,80}

An interesting aspect of our results is the linear low-temperature resistivity observed at the quantum critical doping. As mentioned in section III C, linear T resistivity has already been obtained in spin-fluctuation theory within the so-called *self-consistent renormalization* approach.^{21,78} This is discussed in the review Ref.24. However, this theory is based on the variational approach to the Boltzmann equation. It has been shown with a better variational *ansatz* that the resistivity should be in T^2 .²² That variational *ansatz* is better because it takes into account that hot regions on the Fermi surface that are strongly influenced by spin scattering should be short-circuited by the cold regions. Indeed, it is the conductivities of the different Fermi surface regions that are integrated and not the resistivities. Thus, like parallel resistors, the total resistivity depends only on the more conductive regions. In our results, vertex corrections tend to make the resistivity more quadratic, but a linear term remains at low temperature. In some way, this is not in contradiction with the result of Ref. 22 because, in the present case, the whole Fermi surface is incoherent, or hot, over a range of dopings that extends beyond the QCP. This was checked by calculating the spectral weight at the Fermi level at different typical dopings and temperatures.⁸¹

Another important question is whether, in the quantum critical region above the QCP, the whole Fermi surface is always incoherent, as suggested by some experiments.^{82,83} This is possible because what characterizes this region is that the magnetic fluctuations are strong, but not yet strong enough to destroy any part of the Fermi surface. In addition, instead of having spin excitations that are well defined, they are broad in energy and wave vector, which means that they affect large parts of the Fermi surface and possibly all of it. To understand the transport, it is important to make the distinction between this regime and the pseudogap regime, where the well defined hot spots appear. This distinction is not made in Ref.22. In the present work, the incoherence of the whole Fermi surface may come however from the fact that we have included only nearest-neighbor hoppings and that large parts of the Fermi surface are almost nested. More calculations of the conductivity using second and third nearest-neighbor hoppings will be necessary to verify if this global incoherence of the Fermi surface in the quantum critical region is universal. Note that this is a subtle question that cannot be answered using approaches with adjustable parameters, like those of Refs. 21 and 22, which can give qualitatively different results depending on how those parameters are chosen.

Another interesting point about the linear term in the resistivity is its correlation with the superconducting transition temperature T_c . This correlation seems to be present in all the unconventional superconductors. It has been observed the cuprates, the pnictides, and the organics^{84–87}. In those materials, it seems that the linear coefficient A disappears exactly at the end of the superconducting dome on the overdoped side. Which strongly suggests a common origin for linear resistivity and superconductivity. In the Hubbard model, in the weak to intermediate coupling regime, TPSC finds that superconductivity and linear resistivity also have the same origin, namely the interaction of quasiparticles with antiferromagnetic fluctuations. However, from Fig.5, it does not seem that A disappears completely with T_c , which vanishes at around $p = 0.25$ as shown in the inset of the figure. Note that there is some uncertainty in the values of A that could come from a small systematic error in the resistivity. This is possible because it is difficult to obtain very precise analytically continued results. Nevertheless, it is clear that the most important drop in A is before T_c vanishes.

One striking result we obtain in the pseudogap regime on the left side of the QCP is the change of the resistivity from an insulating to a metallic behavior when the vertex corrections are taken into account. This is an effect of the Aslamazov-Larkin-like contribution which, as mentioned at the end of subsection II D, gives a positive contribution to the conductivity when the density of states below the Fermi level is larger than above. In the present case the Fermi level is just above the Van Hove singularity. The density of states is therefore extremely asymmetric at the Fermi level and that explains why the AL term is so large that it counters both the effect of the one-particle self-energy that makes the bubble result insulating and the effect of the Maki-Thompson-like term that tends to make the system even more insulating. From preliminary results with second and third nearest neighbor hoppings t' and t'' , we notice that the second vertex corrections cannot always compensate the first correction and the resistivity for $p < p_c$ can be higher than the bubble result even with both vertex corrections. This is coherent with the fact that the Fermi level is farther from the Van Hove singularity in those cases, so that the density of states is much less asymmetric around $\omega = 0$ and thus the AL term is much weaker. Those results tell us that the behavior observed in the pseudogap regime on the left side of the QCP in Figs. 4(a) and 4(b) is not universal. However, on the right-hand side of the QCP, the results should be qualitatively the same since eventually Fermi-liquid physics dominate. That is effectively what we observe so far.

Another interesting question is the effect of disorder on the importance of vertex corrections. In our case, as mentioned in section II D, if the vertices do not depend on wave vector, i.e. they are isotropic, they have no effect on the conductivity. Adding disorder would probably make the vertices more isotropic, and therefore

their effect should be smaller. This can also be seen from the point of view of total momentum conservation. The presence of disorder in the system should relax momentum conservation since defects can absorb momentum, so the effect of vertex corrections to increase conductivity should be reduced. Indeed, the increase in conductivity from vertex corrections should come mainly from enforcing total momentum conservation during electron-electron scattering processes. It would be very interesting to see if, by adding enough disorder, we could reduce the effect of vertex corrections to the point where the resistivity recovers its insulating behavior in the pseudogap region. This would also provide one possible explanation for the fact that, in less clean cuprates, such as $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_2\text{O}_4$ the resistivity increases below T^* , while it increases in cleaner systems such as $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$. That contrasting behavior can be seen in Ref. 88 when, for the latter compound, we take the pseudogap line to end at optimal doping. However, from our preliminary results with hoppings t' and t'' relevant for cuprates, we have noticed that, on the hole-doped side, the qualitative behavior with and without vertex corrections can be inverted with respect to the results of Figs. 4(a) and 4(b). That is, the resistivity without vertex corrections decreases below T^* , while it increases with vertex corrections. By changing the band parameters and the doping we can therefore change dramatically the transport properties in the pseudogap regime.

V. CONCLUSION

To satisfy current conservation, conductivity calculations must include vertex corrections that are consistent with the self-energy. A systematic way of achieving this proceeds with functional derivatives with respect to the vector potential. We have shown how this approach can be generalized to the non-perturbative TPSC approach. The various terms of the resulting algebraic expression, Eq.(85), have the physical interpretation illustrated schematically in Fig.1. One type of vertex correction has the structure of the Maki-Thompson term in fluctuation superconductivity, while the other has the structure of the Aslamazov-Larkin term. These diagrams contain many elements that are not computed perturbatively, as for example the irreducible spin and charge vertices, and the vertex corrections. With this approach, the f -sum-rule is satisfied in principle exactly. We verified the agreement to the accuracy of the numerical calculations (a typical relative precision of 10^{-7}).

The numerical evaluation of the conductivity with vertex corrections can be done only if FFT and other advanced numerical algorithms are employed. Brute force calculations are impossible with any kind of computing resource presently available. Analytical continuation is performed with a specialized maximum entropy technique that we have described in detail in appendices, along with all other algorithms.

We have shown that our approach allows us to compute the optical conductivity and DC resistivity of the nearest-neighbor two-dimensional one-band Hubbard model in a variety of regimes, without adjustable parameter or phenomenological assumption. There is no need to assume the existence of quasiparticles, as is the case in Boltzmann equation approaches.

For illustrative purposes, we have presented the results of calculations for $U = 6t$ and nearest neighbor hoppings only. For the DC resistivity, we find at high temperature that it saturates at the Ioffe-Regel value, namely when the mean-free path is of the order of the inter lattice spacing. The existence of this Ioffe-Regel limit is usually assumed on phenomenological grounds. Here we have demonstrated it. That limit may be exceeded in strong coupling⁸⁹, but that is beyond TPSC. Vertex corrections have a dramatic influence for dopings smaller than the quantum critical doping. They can change the temperature dependence of the resistivity from insulating to metallic when the antiferromagnetic correlation length becomes larger than the thermal de Broglie wave length, namely in the pseudogap regime. At the quantum critical point, the resistivity is linear at low temperature, although vertex corrections tend to reduce the temperature range of the linearity compared to the calculation with the bubble only. At low temperature, the linear term persists at dopings larger than the quantum critical point, although we cannot exclude that it disappears at temperatures lower than those accessible to us. The coefficient of this linear term is also correlated with the vanishing of the superconducting T_c obtained in TPSC, in qualitative agreement with experimental results on the cuprates, the pnictides and the organics.^{85,86} For dopings equal or greater than the critical doping, the resistivity with all vertex corrections is always smaller than the simple bubble result. In general, for most of the dopings and temperatures considered, the first vertex correction has the tendency to increase the resistivity, while the second has the opposite effect. Therefore the results of each type of term are always very different and one cannot neglect the Aslamazov-Larkin-like contribution in those regimes.

We observe in the optical conductivity that vertex corrections are important at all the dopings considered and that no term can be neglected. The effect is the strongest for dopings smaller than the critical doping near and below the pseudogap temperature. We also observe that the frequency at which the results with and without vertex corrections cease to differ decrease with increasing doping. The hump structure in the mid-infrared frequency range, related to the pseudogap, is observed both with and without vertex corrections, but with different amplitudes at a given temperature. At the quantum critical point and beyond, the effect is important both at high and low temperature though more important at low temperature. The low frequency part of the conductivity is higher with the vertex corrections and increases quite rapidly with doping.

This work is presently being extended in several direc-

tions. For example, one can study more realistic band parameters for high-temperature superconductors and investigate the connection between the single-particle scattering rate along the Fermi surface and the temperature dependence of the resistivity. The sensitivity of the resistivity to the details of the model in the pseudogap regime would also be interesting to investigate. Using a similar approach, one can also envisage calculating the thermopower and other transport properties.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge Patrick Sémon for useful discussions, especially about the Fourier transforms of splines. A.-M.S.T. also acknowledges Louis Taillefer for discussions about experiment and S. Okamoto and J. Carbotte about Appendix B. We are grateful to L.-F. Arsenault for reading the manuscript. This work was partially supported by NSERC and by the Tier I Canada Research Chair Program (A.-M.S.T.). Computational resources were provided by CFI, MELS, the RQCHP, and Compute Canada.

Appendix A: f -sum rule for the conductivity

In this appendix, we derive the general expression for the real part of the conductivity, Eq. (19), and we show that the zero-Matsubara frequency value of the current-current correlation function suffices to check numerically the validity of the f -sum rule. We begin from the continuity equation,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (\text{A1})$$

which, in Fourier space, reads

$$-\omega \rho(\mathbf{q}, \omega) + \mathbf{q} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) = 0. \quad (\text{A2})$$

If $\mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) = j_x(\mathbf{q}, \omega) \hat{x}$, we have

$$q_x j_x(\mathbf{q}, \omega) = \omega \rho(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{A3})$$

Using space translational invariance, the two-particle spectral function corresponding to an observable A can be written formally as

$$\chi''_{AA}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N\mathbb{T}} \langle [A(\mathbf{q}, \omega), A(-\mathbf{q}, -\omega)] \rangle. \quad (\text{A4})$$

with $\mathbb{T} \rightarrow \infty$, so that, from the continuity equation Eq.(A3) we have the relation between current and charge correlation functions

$$\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\omega^2}{q_x^2} \chi''_{\rho \rho}(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{A5})$$

and thus,

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} = \frac{1}{q_x^2} \int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{\rho \rho}(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{A6})$$

The right-hand side can be obtained from equal-time commutators since

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{\rho \rho}(\mathbf{q}, \omega) = \left(i \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} 2\chi''_{\rho \rho}(\mathbf{q}, \omega) \right) \Big|_{t=0} \quad (\text{A7})$$

and, by definition,

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} 2\chi''_{\rho \rho}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \langle [\rho(\mathbf{q}, t), \rho(-\mathbf{q}, 0)] \rangle, \quad (\text{A8})$$

so that

$$\begin{aligned} \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} &= \frac{1}{q_x^2} \frac{1}{N} \langle [i \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{q}, t), \rho(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \Big|_{t=0} \\ &= \frac{1}{q_x^2} \frac{1}{N} \langle [[\rho(\mathbf{q}), H](t), \rho(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \Big|_{t=0}. \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

Taking for H the Hubbard hamiltonian and calculating the commutators, we get

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} = \frac{1}{q_x^2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (\text{A10})$$

We are interested in the long wave length limit, namely $\mathbf{q} \rightarrow 0$, so that

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} &\approx \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} q_x + \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} q_y \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} q_x^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} q_y^2 + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} q_x q_y \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

and, if we consider the longitudinal conductivity $\mathbf{q} = q_x \hat{x}$, we obtain

$$\begin{aligned} \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega)}{\omega} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \\ &= -\langle k_x \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A12})$$

using the earlier definition Eq. (12).

To derive the general results for the real part of the conductivity Eq. (19), we begin with the spectral form for $\chi_{j_x j_x}(q_x, \omega)$ that reads

$$\chi_{j_x j_x}(q_x, \omega) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta}, \quad (\text{A13})$$

so that, from Eq.(18) and Eq.(A12), we have

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(q_x, \omega) &= \frac{\langle k_x \rangle + \chi_{j_x j_x}(\omega)}{i(\omega + i\eta)} \\ &= \frac{1}{i(\omega + i\eta)} \left(- \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega'} \right. \\ &\quad \left. + \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta} \right) \\ &= \frac{1}{i(\omega + i\eta)} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{(\omega + i\eta) \chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega'(\omega' - \omega - i\eta)} \\ &= \frac{1}{i} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega'(\omega' - \omega - i\eta)} \end{aligned} \quad (\text{A14})$$

and since

$$\frac{1}{\omega' - \omega - i\eta} = P \frac{1}{\omega' - \omega} + i\pi\delta(\omega' - \omega). \quad (\text{A15})$$

we obtain the desired result

$$\text{Re } \sigma_{xx}(q_x, \omega) = \frac{\chi''_{J_x J_x}(q_x, \omega)}{\omega}. \quad (\text{A16})$$

Substituting in the form found earlier Eq.(A12), the f -sum rule for the conductivity is

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Re } \sigma_{xx}(q_x, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad (\text{A17})$$

for $q_x \rightarrow 0$. Since the spectral form for $\chi_{J_x J_x}(q_x, iq_n)$ is

$$\chi_{J_x J_x}(q_x, iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(q_x, \omega)}{\omega - iq_n}, \quad (\text{A18})$$

we have the desired result,

$$\chi_{J_x J_x}(q_x, iq_n = 0) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (\text{A19})$$

It is thus sufficient to look at the zero Matsubara frequency value of $\chi_{J_x J_x}$ to check whether the sum rule is satisfied (assuming that $\langle k_x \rangle$ has been calculated).

Since the results Eq.(A17), or equivalently Eq.(A19), are a consequence of the continuity equation, it means this sum rule must be respected when there is conservation of particle number.

Appendix B: Ward Identity

In this appendix, we derive the general Ward identity that follows from charge conservation. It is far too complicated to be verified in full generality numerically within our approach. We also indicate that the Ward identity suffices to find the vertex correction simply in cases where frequency and momentum variations are smooth. These assumptions are not fulfilled in our case hence these simplifications cannot be used.

We begin from linear response theory in imaginary time. We omit the diamagnetic term, which is not relevant for the present discussion. We find,

$$\langle \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}}(\tau) \rangle = \int_0^\beta d\tau' \langle T_\tau \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}}(\tau) \hat{\mathbf{j}}_{-\mathbf{q}}(\tau') \rangle \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(\tau') \quad (\text{B1})$$

where $\hat{\mathbf{j}}$ is the paramagnetic current in the interaction representation. Take a single (bosonic) Matsubara frequency for the vector potential

$$\mathbf{A}_{\mathbf{q}}(\tau') = T \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(q_m) e^{-iq_m \tau'} \quad (\text{B2})$$

and extract the corresponding Matsubara frequency for the current, then the quantity to evaluate is

$$\langle \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}}(q_m) \rangle = T \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{iq_m(\tau-\tau')} \langle T_\tau \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}}(\tau) \hat{\mathbf{j}}_{-\mathbf{q}}(\tau') \rangle \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(q_m) \quad (\text{B3})$$

$$= T \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{iq_m(\tau-\tau')} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}'} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^\dagger(\tau') c_{\mathbf{k}'\sigma}(\tau') \rangle \nabla_{\mathbf{k}'} \epsilon_{\mathbf{k}'} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(q_m) \quad (\text{B4})$$

where, in the last equality, we have also used spin conservation with the fact that only the connected piece will contribute because the average current in equilibrium vanishes.

The Ward identity that we need can be obtained from the single spin component version of following equality that can be derived from current conservation,⁹⁰

$$\sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right] \langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{k}'\sigma}(\tau_2) \rangle \quad (\text{B5})$$

$$= \delta(\tau - \tau_1) G_{\mathbf{k}'\sigma}(\tau_2 - \tau) - \delta(\tau - \tau_2) G_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}(\tau - \tau_1). \quad (\text{B6})$$

Current conservation, that we saw in the first two equations, would give a vanishing right-hand side were it not for the theta functions whose derivatives give delta functions and ultimately equal-time commutators that can be evaluated.

Define the fermionic Matsubara frequency four-point correlation function

$$\begin{aligned} \Lambda_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') \\ \equiv \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{ik_m(\tau - \tau_1)} e^{ik'_n(\tau_2 - \tau)} \left\langle T_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{\mathbf{k}'\sigma}(\tau_2) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{B7})$$

Then, taking the same fermionic components of the Ward identity, integrating by parts, it takes the form

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} [(-ik_m + ik'_n) + (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})] \Lambda_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') \\ = G_{\mathbf{k}'\sigma}(k'_n) - G_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}(k_m) \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

We need the amputated function that is summed over all wave vectors to compute the current-current correlation function. So let us define the charge and current three point vertices (for a single spin component), valid in the small \mathbf{q} limit

$$\begin{aligned} \Gamma_\rho(k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') \\ = - \sum_{\mathbf{k}} \Lambda_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') G_{\mathbf{k}'\sigma}^{-1}(k'_n) G_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^{-1}(k_m) \end{aligned} \quad (\text{B9})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q} \Gamma_J(k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') \\ = - \mathbf{q} \sum_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \Lambda_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') G_{\mathbf{k}'\sigma}^{-1}(k'_n) G_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^{-1}(k_m) \end{aligned} \quad (\text{B10})$$

Then, in the long wave length limit, the general Ward identity Eq (B8) can be rewritten for the three-point functions as follows

$$\begin{aligned} (ik_m - ik'_n) \Gamma_\rho - \mathbf{q} \Gamma_J = G_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^{-1}(k_m) - G_{\mathbf{k}'\sigma}^{-1}(k'_n) \\ = (ik_m - ik'_n) - \mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \Sigma_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}(k_m) + \Sigma_{\mathbf{k}'\sigma}(k'_n) \end{aligned} \quad (\text{B11})$$

We can obtain the four-point function that we need in the expression for the current Eq (B4) from the fermionic Matsubara expression Eq (B7) for the four point function at $\tau_1 = \tau_2 = \tau'$ as follows

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}_{\mathbf{q}}(q_m) \rangle = T \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{iq_m(\tau - \tau')} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}'} T \sum_{k_m} T \sum_{k'_n} \\ e^{-ik_m(\tau - \tau')} e^{-ik'_n(\tau' - \tau)} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \Lambda_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') \nabla_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}'} \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(q_m) \end{aligned} \quad (\text{B12})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}'} T \sum_{k'_n} \quad (\text{B13})$$

$$\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \Lambda_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, k'_n + q_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}') \nabla_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}'} \mathbf{A}_{\mathbf{q}}(q_m) \quad (\text{B14})$$

The sum over wave vectors \mathbf{k} allows one to rewrite the latter in terms of the current vertex defined in Eq (B10)

$$\langle \mathbf{j}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}(q_m) \rangle = - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}'} T \sum_{k'_n} \quad (\text{B15})$$

$$\Gamma_J(k'_n + q_m, \mathbf{k}', k'_n, \mathbf{k}') G_{\mathbf{k}'}^{-1}(k'_n) G_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma}^{-1}(k'_n + q_m) \nabla_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}'} \mathbf{A}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}(q_m) \quad (\text{B16})$$

We have performed the sum over spins, which explains the factor two, and taken the $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ limit first to represent a constant electric field

There is a simple case where the Ward identity suffices to find the vertex correction. Consider the Ward identity for the three point function Eq (B11). The rest of this Appendix is correct only if we can assume that in the $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ finite frequency $ik_m - ik'_n$ limit, the

charge vertex $\Gamma_\rho(k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}')$ and current vertex $\Gamma_J(k_m, \mathbf{k}' + \mathbf{q}, k'_n, \mathbf{k}')$ are analytical in \mathbf{q} and have a finite limit at $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. It can be checked that this is the case for the non-interacting system. In that case, all the non-analyticities are contained in the product of Green's func-

tions appearing in our last expression for $\langle \mathbf{j}_{\mathbf{q}=0}(q_m) \rangle$. While these kinds of analytic properties can be assumed for Fermi liquids, this is *not* appropriate in our case, that is more singular in the presence of strong antiferromagnetic fluctuations.

In the case where we can assume analyticity, the expansion for Γ_ρ in powers of \mathbf{q} must begin at order q^2 because it is a scalar. Then, the long wave length limit of the vertices can be found by identifying the coefficients of the $(ik_m - ik'_n)$ and of the \mathbf{q} on the left and right-hand side of the Ward identity for the three point function Eq.(B11). For the charge three point function we thus find

$$\Gamma_\rho(k_m, \mathbf{k}'; k'_n, \mathbf{k}') = 1 - \frac{\Sigma_{\mathbf{k}'\sigma}(k_m) - \Sigma_{\mathbf{k}'\sigma}(k'_n)}{(ik_m - ik'_n)}. \quad (\text{B17})$$

while for the current vertex, taking the $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ limit, one obtains

$$\Gamma_J(k_m, \mathbf{k}'; k'_n, \mathbf{k}') = \nabla_{\mathbf{k}'} \epsilon_{\mathbf{k}'} + \nabla_{\mathbf{k}'} \Sigma_{\mathbf{k}'\sigma}(k_m). \quad (\text{B18})$$

The first term in the last two equations is the bare vertex and the last term the vertex correction. These results for the vertex corrections are valid, for example, for impurity scattering or electron-phonon interactions where the assumptions upon which they were derived are valid,⁹¹ but not in our case where the gradient of the self-energy with respect to wave vector can be very large, for example near hot spots. The above two equations by themselves are often called the Ward identities.⁹¹

Appendix C: Fast-Fourier transforms, cubic splines and asymptotic expansions

The use of fast-Fourier transforms (FFTs) is absolutely essential for this calculation. We begin by describing their use for obtaining the Lindhard function Eq.(22) and the self-energy where the convolutions that render FFTs possible are apparent. The convolutions are not so apparent in the case of the conductivity, particularly the Aslamasov-Larkin like terms, that require an elaborate discussion in the third subsection.

1. The Lindhard function

The Lindhard function Eq.(22) is needed to compute the spin and charge susceptibilities Eq.(20) and Eq.(21), which is defined in a more explicit way as

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} G^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n), \quad (\text{C1})$$

with

$$G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu_0} \quad (\text{C2})$$

where $\epsilon_{\mathbf{k}}$ is the bare particle dispersion relation, $k_n = (2n+1)\pi T$ is a Fermionic Matsubara frequency and μ_0 is the bare chemical potential. Expression (C1) could be calculated by first performing analytically the sum over Matsubara frequencies to obtain

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{iq_n + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \quad (\text{C3})$$

where $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0$ and $f(\xi_{\mathbf{k}})$ is the Fermi-Dirac distribution, and then integrating numerically over \mathbf{k} for each value of (\mathbf{q}, iq_n) . While it may seem that we have saved some work by doing exactly the Matsubara sum, by doing so we do not use a property of Eq.(C1) that can make our calculation much easier. This is the fact that this expression is a convolution, and convolutions can be calculated in a very efficient way using fast-Fourier transforms (FFT). For instance, Eq.(C1) can be written as

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau), \quad (\text{C4})$$

where $\beta = T^{-1}$.

To compute $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ on a grid of size $N_{\mathbf{q}} N_{q_n}$ using the form where Matsubara sums have been done, Eq.(C3), one needs to do this number of integrals over the Brillouin zone, a number of operations that scales like $N_{\mathbf{q}}^2 N_{q_n}$ if we consider that each integral scales like $N_{\mathbf{q}}$. On the other hand, using the convolution form Eq.(C4), we need to do a two-dimensional FFT on $G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)$ to obtain $G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$ (here, $G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)$ is known analytically), a task that scales like $N_{\mathbf{q}} N_{q_n} \log N_{\mathbf{q}}$, and then the three-dimensional FFT in Eq.(C4) that scales like $N_{\mathbf{q}} N_{q_n} \log N_{\mathbf{q}} N_{q_n}$. We therefore have a gain proportional to $N_{\mathbf{q}} / \log N_{\mathbf{q}} N_{q_n}$.

There is one delicate point. Eq.(C4) contains a continuous Fourier transform (FT) on the imaginary time τ while FFTs are discrete Fourier transforms. The simplest thing to do would be to discretize τ and perform an ordinary FFT. This would give acceptable results for the low Matsubara frequencies but the high frequencies would be completely wrong since $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ would be periodic in q_n while it has to decrease as a series in even powers of $1/q_n$. To solve this problem we make use of cubic splines to approximate the integrand between the discrete imaginary time points and perform a continuous Fourier transform on this spline. In appendix E, we show how to compute the continuous Fourier transform of a cubic spline using in fact only a discrete Fourier transform. Let us consider first the imaginary time Fourier transform in Eq.(C4). Using the form (E7) given in appendix E, we obtain

$$\chi_0(\mathbf{r}, iq_n) = \frac{\chi'_0(\mathbf{r}, \tau = \beta) - \chi'_0(\mathbf{r}, \tau = 0)}{q_n^2} + \frac{1 - e^{iq_n \Delta \tau}}{q_n^4} \sum_{j=0}^{N-1} S_{j+1}^{(3)}(\mathbf{r}) e^{iq_n \tau_j}, \quad (\text{C5})$$

where N is the number of intervals in the imaginary time grid. $\Delta\tau$ is the size of an interval, $S_j(\mathbf{r}, \tau)$ is the cubic polynomial in the j^{th} interval and $S_j^{(3)}(\mathbf{r})$ is the third derivative of $S_j(\mathbf{r}, \tau)$.

Notice that Eq.(C5) contains the discrete Fourier transform of $S_j^{(3)}(\mathbf{r})$, so that the result of this transform itself will be periodic in q_n . But the factor $1/(q_n^4)$ in front makes this term important only for low frequencies. Note that expression (C5) contains the derivatives of $\chi_0(\mathbf{r}, \tau)$ with respect to τ at the boundaries. It is explained in appendix E how those derivatives are used to complete the linear system that must be solved to obtain the spline coefficients. They thus have to be calculated before the spline and must be known when Eq.(C5) is used. Here since $\chi_0(\mathbf{r}, \tau) = G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)$, and we have analytical expressions for $G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)$, it is straightforward to calculate this derivative. For $0 < \tau < \beta$, we have

$$\begin{aligned} G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau) &= -e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(-\xi_{\mathbf{k}}) \\ &= -e^{\xi_{\mathbf{k}}(\beta-\tau)} f(\xi_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (\text{C6})$$

so that

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(-\xi_{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}(\beta-\tau)} f(\xi_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (\text{C7})$$

Then, still for $0 < \tau < \beta$,

$$G^{(1)}(\mathbf{k}, -\tau) = e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}) \quad (\text{C8})$$

and, therefore,

$$\frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}). \quad (\text{C9})$$

If we have inversion symmetry,

$$G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau) = G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau), \quad (\text{C10})$$

then

$$\frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}), \quad (\text{C11})$$

and we have

$$\frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \beta - \tau)}{\partial \tau}. \quad (\text{C12})$$

2. The self-energy

The next function we can calculate using FFTs is the self-energy Eq.(26) that can be written as

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, i k_n) &= U n_{-\sigma} \\ &+ \int d\tau e^{i k_n \tau} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(-\mathbf{r}, -\tau) G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau), \end{aligned} \quad (\text{C13})$$

where

$$V(\mathbf{r}, \tau) = \frac{U}{8} [3U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{r}, \tau) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{r}, \tau)]. \quad (\text{C14})$$

To calculate $V(\mathbf{r}, \tau)$ accurately, we can use the fact that $\chi_{sp}(\mathbf{q}, i q_n)$ and $\chi_{ch}(\mathbf{q}, i q_n)$ approach asymptotically $\chi_0(\mathbf{q}, i q_n)$ as q_n increases and that $\chi_0(\mathbf{r}, \tau)$ is known once $G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$ is. Then $V(\mathbf{r}, \tau)$ is computed from

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}, \tau) &= \\ \frac{U}{8} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, i q_n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-i q_n \tau} &\left[3U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, i q_n) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, i q_n) \right. \\ &\left. - (3U_{sp} + U_{ch}) \chi_0(\mathbf{q}, i q_n) \right] \\ &+ \frac{U}{8} (3U_{sp} + U_{ch}) \chi_0(\mathbf{r}, \tau), \end{aligned} \quad (\text{C15})$$

where $\chi_0(\mathbf{r}, \tau) = -2G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)G_{\sigma}^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)$. Because the asymptotic part is removed in the Fourier transform, it converges as the transform of $1/(q_n^4)$ instead of $1/(q_n^2)$, so that a smaller cutoff can be used.

In Eq.(C13), there is a continuous Fourier transform so that we have to use cubic splines to represent the τ -dependence of the integrand. To compute the splines and then use formula (E7) we need to compute the derivatives of $V(-\mathbf{r}, -\tau)G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$ at $\tau = 0$ and $\tau = \beta$, i.e. those derivatives of $V(-\mathbf{r}, -\tau)$ and $G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$. The latter were already computed using Eq. (C7) to calculate χ_0 . For $V(-\mathbf{r}, -\tau)$, since this function is symmetric with respect to $\tau = \beta/2$, we only need the derivative at $\tau = 0$. If we differentiate expression (C15) with respect to τ and set $\tau = 0$, we notice that the sum disappears since $\chi_{sp}(\mathbf{q}, i q_n)$ and $\chi_{ch}(\mathbf{q}, i q_n)$ are even functions of q_n while the derivative makes a factor q_n appear in the sum. In other words, at $\tau = 0$ (and thus $\tau = \beta$), the derivatives of $\chi_{sp}(\tau)$, $\chi_{ch}(\tau)$ and $\chi_0(\tau)$ are equal, which comes from the fact that they have the same asymptotic limit as can be seen from Eq.(E7) (with $k = q_n$), considering that there are no odd terms for those functions. Therefore, we have

$$\left. \frac{\partial V(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0} = \frac{U}{8} (3U_{sp} + U_{ch}) \left. \frac{\partial \chi_0(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}. \quad (\text{C16})$$

Once the self-energy Eq.(C13) is obtained, we have to calculate the interacting chemical potential μ to define the Green's function $G^{(2)}$ as

$$G^{(2)}(\mathbf{k}, i k_n) = \frac{1}{i k_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, i k_n)}. \quad (\text{C17})$$

For a given filling $\langle n \rangle$, μ is defined implicitly by the equation

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= 2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau = 0^-) \\ &= 2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, i k_n} e^{-i k_n 0^-} G^{(2)}(\mathbf{k}, i k_n). \end{aligned} \quad (\text{C18})$$

However, this expression is not very practical numerically because of the convergence factor $e^{-ik_n 0^-}$ that is not well defined numerically. We use instead

$$2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \left[G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] = 0, \quad (\text{C19})$$

where it is assumed that $G^{(1)}$ contains the chemical potential μ_0 that gives the desired filling. No convergence factor is needed since the sum converges as the sum of $1/(k_n^2)$.

3. The current-current correlation function

Finally we come to the calculation of $\chi_{j_x j_x}$, Eq. (85). The first term, called the “bubble” contribution because of its bubble shape in figure 1, can be written as

$$\begin{aligned} \chi_{j_x j_x}^b(iq_n) &= \\ &= \frac{-2T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\ &= \frac{-2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) G^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau). \end{aligned} \quad (\text{C20})$$

To use this formula we first have to compute $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ from $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ defined in Eq.(C17). To do that we

cannot simply perform a Fourier transform with respect to ik_n on $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ including only a finite number of frequencies. This is because $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ has a discontinuity at $\tau = 0$ that will produce oscillations (the Gibbs phenomenon) close to $\tau = 0$ and $\tau = \beta$ (remember that $G(\mathbf{k}, \beta - \tau) = -G(\mathbf{k}, -\tau)$). This problem can be solved by using the asymptotic form of $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ to perform the transform on all frequencies. First, let us define $\bar{G}(\mathbf{k}, \tau)$, the Fourier transform of some Green's function $G(\mathbf{k}, ik_n)$ on a finite set of frequencies.

$$\begin{aligned} \bar{G}(\mathbf{k}, \tau_j) &= T \sum'_{ik_n} e^{-ik_n \tau_j} G(\mathbf{k}, ik_n) \\ &= e^{i\pi(N_\tau - 1)j/N_\tau} T \sum_{n=0}^{N_\tau - 1} e^{-i2\pi n j/N_\tau} G(\mathbf{k}, ik_{n - \frac{N_\tau}{2}}). \end{aligned} \quad (\text{C21})$$

where \sum' means that the sum is finite, N_τ is the number of values of τ and we have used $k_n = (2n + 1)\pi T$ and $\tau_j = j/(N_\tau T)$. The sum in second line has the form used in standard FFT routines. Now, to compute the self energy Eq. (C13), we have used Fourier transforms of cubic splines so that $\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ has the form Eq.(E7). The asymptotic form of $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ is therefore

$$G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_m - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \Sigma_{inf}(\mathbf{k}, ik_n)} = \frac{1}{ik_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{s_1}{ik_n} + \frac{s_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{s_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3} \right)} \quad (\text{C22})$$

where $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. The Fourier transform over ik_n of this function can be done analytically using the residue theorem. For a function $g(z)$ having only simple poles, we have

$$T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} g(ik_m) = \begin{cases} - \sum_{z=z_j} \text{Res}[g(z)] f(-z_j) e^{-z_j \tau}, & 0 < \tau < \beta, \\ \sum_{z=z_j} \text{Res}[g(z)] f(z_j) e^{-z_j \tau}, & -\beta < \tau < 0, \end{cases} \quad (\text{C23})$$

which, applied to (C22), gives

$$G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = \mp \sum_{j=1}^4 e^{-z_j(\mathbf{k})\tau} f(\mp z_j(\mathbf{k})) \frac{[z_j(\mathbf{k})]^3}{[z_j(\mathbf{k}) - z_1(\mathbf{k})] \dots [z_j(\mathbf{k}) - z_{j-1}(\mathbf{k})][z_j(\mathbf{k}) - z_{j+1}(\mathbf{k})] \dots [z_j(\mathbf{k}) - z_4(\mathbf{k})]}, \quad (\text{C24})$$

where the minus sign is for $0 < \tau < \beta$ and the plus sign, for $-\beta < \tau < 0$. The $z_j(\mathbf{k})$ are the roots of the polynomial

$$z^4 - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} z^3 - s_1 z^2 - s_2(\mathbf{k}) z - s_3(\mathbf{k}). \quad (\text{C25})$$

Those roots are given by quite imposing, but analytical formulas. Finally, assuming that $\bar{G}_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ is the finite Fourier transform of $G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ as defined in Eq.(C21).

we use

$$G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = \bar{G}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) + \left[G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) - \bar{G}_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) \right] \quad (C26)$$

where the term between the brackets is the contribution from frequencies beyond the cutoff used in Eq.(C21). This expression will be very accurate if the asymptotic behavior is well obeyed beyond the cutoff. Using the somewhat complicated expression (C22) as the asymptotic form of $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ may seem to complicate the calculations needlessly since the first term of the high frequency expansion of $G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n)$ is identical to that of $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$. However, to compute the cubic spline of the integrand in Eq.(C20), and then its Fourier transform, we need the derivatives of $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ at $\tau = 0$ and $\tau = \beta$ and, for that purpose, we have to use a more accurate asymptotic form. The reason will be explained shortly.

As we have just mentioned, we need to compute derivatives of Eq.(C26) with respect to τ at the boundaries. Let us first rewrite expression (C26) using Eq.(C21),

$$G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = T \sum'_{ik_n} e^{-ik_n \tau} \left[G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] + G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) \quad (C27)$$

so that

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} = & T \sum'_{ik_n} (-ik_n) \left[G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] \\ & + \frac{\partial G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0}, \end{aligned} \quad (C28)$$

where the last term is obtained from the derivative of Eq.(C24). If $G_{inf}^{(2)}$ was taken to be $G^{(1)}$, the sum in (C27) would converge like the sum of $1/(ik_n)^2$, but the sum in (C28) would not converge. Thus, $G_{inf}^{(2)}$ must have at least the same first two terms in its high frequency expansion as $G^{(2)}$. If we use Eq.(C22), the first five terms in the expansion are equal, the sum in (C27) thus converges as the sum of $1/(ik_n)^6$, while the sum in (C28), as the sum of $1/(ik_n)^5$. This gives us a very precise evaluation of $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ and its derivatives. To obtain the derivatives at $\tau = \beta$ we use the relation

$$\frac{\partial G(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\beta} = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \frac{\partial G(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} \quad (C29)$$

that is derived from the spectral representation of $G(\mathbf{k}, \tau)$.

Once $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ and its derivatives are obtained, the integrals in expression (C20) are evaluated by computing the cubic splines for $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)G^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau)$ and using formula (E7) for the Fourier transform. The rest of

the calculation is simply a sum over the Brillouin zone, where, of course, it is preferable to use the symmetries of the system to save computational resources.

The second, Maki-Thompson like, term of Eq.(85) is

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n) = & -\frac{U}{4} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1 k_2} G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) \\ & \times \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) [3U_{sp} \chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch} \chi_{ch}(k_2 - k_1)] \end{aligned} \quad (C30)$$

where $k_1 + iq_n = (\mathbf{k}_1, ik_m + iq_n)$. If we define

$$\begin{aligned} f_n(k_2) &= \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) \\ V(k_2 - k_1) &= \frac{U}{8} [3U_{sp} \chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch} \chi_{ch}(k_2 - k_1)], \end{aligned} \quad (C31)$$

then Eq.(C30) becomes

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n) = & -2 \frac{T}{N} \sum_{k_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \\ & \times \frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) V(k_2 - k_1). \end{aligned} \quad (C32)$$

The sum over k_2 being a convolution, we have

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n) = & -\frac{T}{N} \sum_k \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} G^{(2)}(k) G^{(2)}(k + iq_n) \\ & \times \sum_{\bar{1}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \bar{1}} f_n(\bar{1}) V(\bar{1}). \end{aligned} \quad (C33)$$

Note that the sum over $\bar{1}$ written in explicit form is

$$\sum_j \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} e^{ik_m \tau} f_n(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau). \quad (C34)$$

where the function $f_n(\mathbf{r}, \tau)$ is given by

$$\begin{aligned} f_n(\mathbf{r}, \tau) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \\ & \times T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n). \end{aligned} \quad (C35)$$

Since $G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m)$ is the non-interacting Green's function, the Fourier transform over ik_m can be done analytically. Using (C23), we obtain, for $q_n \neq 0$,

$$\begin{aligned} T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\ = \frac{e^{iq_n \tau} - 1}{iq_n} e^{-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} [\theta(\tau)(1 - f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})) - \theta(-\tau)f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})]. \end{aligned} \quad (C36)$$

For $q_n = 0$, there is a double pole so that the calculation with the residue theorem is slightly different. However, we can use the simple following trick,

$$\begin{aligned}
T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m)^2 &= T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} \left(\frac{1}{ik_m - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right)^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} \left(\frac{1}{ik_m - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \left(-e^{-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} [(1 - f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}))\theta(\tau) - f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}})\theta(-\tau)] \right) \\
&= e^{-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} \left(\tau [(1 - f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}))\theta(\tau) - f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}})\theta(-\tau)] + \frac{\partial f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}})}{\partial \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right). \quad (C37)
\end{aligned}$$

For $\tau > 0$ and $q_n \neq 0$, we have

$$\begin{aligned}
f_n(\mathbf{r}, \tau) &= \frac{e^{iq_n \tau} - 1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} f(-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{-\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} \\
&= \frac{e^{iq_n \tau} - 1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{(\beta - \tau)\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \\
&= g_n(\tau) h(\mathbf{r}, \tau). \quad (C38)
\end{aligned}$$

The functions $f_n(\mathbf{r}, \tau)$ for different values of n are thus obtained by multiplying the n independent function

$$h(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} f(\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{(\beta - \tau)\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \quad (C39)$$

by $g_n(\tau) = (e^{iq_n \tau} - 1)/(iq_n)$. Using this result, we find

$$\begin{aligned}
\sum_{\bar{\mathbf{l}}} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{\mathbf{l}}} f_n(\bar{\mathbf{l}}) V(\bar{\mathbf{l}}) &= \\
&= \int d\tau e^{ik_m \tau} g_n(\tau) \sum_j e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau). \quad (C40)
\end{aligned}$$

Inserting this back into Eq.(C33), we obtain for the $q_n \neq 0$ terms,

$$\begin{aligned}
\chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n) &= \\
&- 2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ik_m} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\
&\quad \times \int d\tau e^{ik_m \tau} g_n(\tau) \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \\
&= -\frac{2}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\
&\quad \times \left(\int d\tau e^{i(k_m + q_n)\tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \right. \\
&\quad \left. - \int d\tau e^{ik_m \tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \right). \quad (C41)
\end{aligned}$$

To make the convolutions more apparent, we define

$$\begin{aligned}
J(\mathbf{k}, ik_m) &= \\
G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) \int d\tau e^{ik_m \tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \quad (C42)
\end{aligned}$$

to write

$$\begin{aligned}
\chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n) &= \\
&- \frac{2}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \left(T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) J(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \right. \\
&\quad \left. - T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) J(\mathbf{k}, ik_m) \right) \quad (C43)
\end{aligned}$$

that allows us to use the convolution theorem

$$\begin{aligned}
\chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n) &= \\
&- \frac{2}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \left(\int_0^\beta d\tau e^{-iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) J(\mathbf{k}, -\tau) \right. \\
&\quad \left. - \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) J(\mathbf{k}, -\tau) \right). \quad (C44)
\end{aligned}$$

Note that, since all the Matsubara sums have been transformed into Fourier transforms that can be done with FFTs and that an FFT gives all N values of a N point transform at the same time, we obtain the values of $\chi_{J_x J_x}^{v_1}(iq_n)$ for all iq_n except $iq_n = 0$ at the same time when the last FFT is done.

We still need to do the Fourier transform over τ in Eq.(C42) using cubic splines. For that we need the derivatives of $h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau)$ at $\tau = 0$ and $\tau = \beta$. The derivatives of $V(\mathbf{r}_j, \tau)$ have already been used to compute the self-energy and are obtained using Eq.(C16). For $h(\mathbf{r}_j, \tau)$, the derivative is obtained from the definition (C39).

Next, we have to compute $J(\mathbf{k}, -\tau)$. First, we define the function

$$Q(\mathbf{k}, ik_n) = \int d\tau e^{ik_n \tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \quad (C45)$$

so that the definition (C42) reads $J(\mathbf{k}, ik_m) = G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) Q(\mathbf{k}, ik_n)$. Since the Fourier transform over τ is done using the method described in appendix E, the asymptotic form of $Q(\mathbf{k}, ik_n)$ is

$$Q_{inf}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{q_1(\mathbf{k})}{ik_n} + \frac{q_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{q_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3}, \quad (C46)$$

so that, using Eq.(C22) for $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m)$, the asymptotic form for $J(\mathbf{k}, ik_m)$ is,

$$\begin{aligned}
J_{inf}(\mathbf{k}, ik_n) &= \frac{1}{ik_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{s_1}{ik_n} + \frac{s_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{s_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3} \right)} \\
&\quad \times \left(\frac{q_1(\mathbf{k})}{ik_n} + \frac{q_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{q_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3} \right) \quad (C47)
\end{aligned}$$

and its Fourier transform is

$$J_{inf}(\mathbf{k}, -\tau) = \sum_{j=1}^4 e^{z_j(\mathbf{k})\tau} f(z_j(\mathbf{k})) \times \frac{q_1(\mathbf{k})[z_j(\mathbf{k})]^2 + q_2(\mathbf{k})z_j(\mathbf{k}) + q_3(\mathbf{k})}{\prod_{i \neq j} [z_j(\mathbf{k}) - z_i(\mathbf{k})]}, \quad (\text{C48})$$

where the $z_j(\mathbf{k})$ are the roots of the polynomial (C25). By analogy with our previous calculations, the function $J(\mathbf{k}, -\tau)$ is then obtained from

$$J(\mathbf{k}, -\tau) = T \sum'_{ik_n} e^{ik_n\tau} [J(\mathbf{k}, ik_n) - J_{inf}(\mathbf{k}, ik_n)] + J_{inf}(\mathbf{k}, -\tau) \quad (\text{C49})$$

where \sum' means that sum is over a finite number of frequencies.

Once these results are substituted in the expression for the Maki-Thompson term Eq.(C44), we need the derivatives of $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)J(\mathbf{k}, -\tau)$ at $\tau = 0$ and $\tau = \beta$. For $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$, they are given by Eq.(C28) and Eq.(C29). As for the derivatives of $J(\mathbf{k}, -\tau)$, they are obtained by differentiating Eq.(C49).

Finally, we need to evaluate separately the $q_n = 0$ term for $\tau > 0$. It reads

$$f_0(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) T \sum_{ik_m} e^{-ik_m\tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m)^2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) e^{-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}\tau} \left(\tau f(-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) + \frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})}{\partial \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right). \quad (\text{C50})$$

so that

$$\chi_{j_x j_x}^{v_1}(0) = -2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) \times \int_0^\beta d\tau \sum_j e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{ik_m\tau} f_0(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau). \quad (\text{C51})$$

Using our previous definition, (C31) for $f_n(k_2)$, the third, Aslamasov-Larkin like, term in Eq.(85) can be rewritten as

$$\chi_{j_x j_x}^{v_2}(iq_n) = \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, q_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \times \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \times \frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) \left[G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1) \right]. \quad (\text{C52})$$

The sum over k_2 is the sum of two convolutions and can be written as

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) \left[G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1) \right] &= \sum_{\bar{1}} \left(e^{i(q_1 + iq_n) \cdot \bar{1}} + e^{-iq_1 \cdot \bar{1}} \right) f_n(\bar{1}) G^{(1)}(-\bar{1}) \\ &= \sum_j \int_0^\beta d\tau \left(e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{iq_m\tau} \right) f_n(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(-\mathbf{r}_j, -\tau) \\ &= \int_0^\beta d\tau \left(-e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{iq_m\tau} \right) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} f_n(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau), \end{aligned} \quad (\text{C53})$$

where we have used $f_n(-\mathbf{r}_j, \tau) = -f_n(\mathbf{r}_j, \tau)$ and $G^{(1)}(-\mathbf{r}_j, -\tau) = G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau)$. Using $f_n(\mathbf{r}, \tau) = g_n(\tau)h(\mathbf{r}, \tau)$, Eq.(C38), we have

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) \left[G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1) \right] = \\ \int d\tau \left(-e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{iq_m\tau} \right) g_n(\tau) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau) \\ = \frac{1}{iq_n} \int d\tau \left(-e^{-iq_m\tau} + e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{i(q_m + q_n)\tau} - e^{iq_m\tau} \right) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau). \end{aligned} \quad (\text{C54})$$

assuming $q_n \neq 0$. Inserting this expression into Eq.(C52), we get

$$\begin{aligned} \chi_{j_x j_x}^{v_2}(iq_n) = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, q_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \\ \times \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \\ \times \int d\tau \left(-e^{-iq_m\tau} + e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{i(q_m + q_n)\tau} - e^{iq_m\tau} \right) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau). \end{aligned} \quad (\text{C55})$$

Using the definitions

$$\bar{G}_n^{(1)}(k_1 + q_1) = G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \quad (\text{C56})$$

and

$$\begin{aligned} H_n(q_1) = \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \\ \times \int d\tau \left(e^{i(q_m + q_n)\tau} + e^{-i(q_m + q_n)\tau} - e^{iq_m\tau} - e^{-iq_m\tau} \right) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau), \end{aligned} \quad (\text{C57})$$

Eq.(C55) reads

$$\begin{aligned} \chi_{j_x j_x}^{v_2}(iq_n) = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{k_1} \frac{\partial c_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \frac{T}{N} \sum_{q_1} \bar{G}_n^{(1)}(k_1 + q_1) H_n(q_1) \\ = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{k_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \sum_{\bar{1}} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{1}} \bar{G}_n^{(1)}(-\bar{1}) H_n(\bar{1}). \end{aligned} \quad (\text{C58})$$

where the sum over q_1 was written as a Fourier transform. Unfortunately, since this transform does not give a function of k_1 or $k_1 + iq_n$, or a sum of either, because the dependence on iq_n in $H_n(q_1)$ does not factor out as a sum of exponentials, the sum over k_1 does not have the form of a convolution or a sum of convolutions and has to be done in the form Eq.(C58) for each different frequency iq_n .

Now, some work remains to be done before one can do the Fourier transform over $\bar{1}$ in Eq.(C58). First,

$G_n^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$ is explicitly given by

$$G_n^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} T \sum_m e^{-ik_m\tau} \frac{1}{ik_m + iq_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C59})$$

so that changing summation variable above or using Eq.(C23), we obtain

$$G_n^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) = e^{iq_n\tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau). \quad (\text{C60})$$

Eq (C58) thus becomes

$$\begin{aligned} \chi_{j_x j_x}^{i_2}(iq_n) = & \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\ & \times \sum_{\mathbf{r}} \int d\tau e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i(k_m + q_n)\tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) H_n(\mathbf{r}, \tau) \end{aligned} \quad (C61)$$

There is however a problem if we directly use $H_n(\mathbf{r}, \tau)$ in Eq (C61). From the definition (C57), one notices that $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ is peaked at the frequency $q_m = -q_n$ because of the factor

$$\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \quad (C62)$$

in the spin part. Therefore, $H_n(\mathbf{r}, \tau)$ has oscillations in τ at the frequency q_n and it is necessary to refine the grid in τ when q_n increases. $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ is also peaked at $q_m = 0$ because of the factor

$$\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \quad (C63)$$

It is therefore not sufficient to express $H_n(\mathbf{r}, \tau)$ using a function shifted in frequency multiplied by an oscillating function. By doing that we would reduce at most the oscillation frequency by half. Instead, we express $H_n(\mathbf{r}, \tau)$ as a sum of two functions, one peaked at $q_m = 0$ and the other, at $q_m = -q_n$. Then we will be able to apply a translation in frequency to the latter and factor out the oscillating part. First, we write

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} = & \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \\ + & \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \end{aligned} \quad (C64)$$

If we define

$$D(\mathbf{q}, iq_m) = \int d\tau (e^{iq_m \tau} + e^{-iq_m \tau}) \sum_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau), \quad (C65)$$

the spin part of $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ reads

$$\begin{aligned} - & \frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_m) \\ + & \frac{D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) - D(\mathbf{q}, iq_m)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) \end{aligned} \quad (C66)$$

Note that, since $D(\mathbf{q}, iq_m)$ and $\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)$ are even functions, the function

$$\frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \quad (C67)$$

is undetermined when $q_m = -q_n/2$, which happens when n is even. However, we know that $H_n(\mathbf{q}, -\frac{iq_n}{2})$ vanishes so that one can assume an arbitrary value for Eq (C67) at that point. Numerically, it is better for that factor to be smooth. This is achieved by using a simple interpolation to fix that value.

Now if we define the function

$$\begin{aligned} I_n(\mathbf{q}, iq_m) = & 3U_{sp} \frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \\ + & U_{ch} \frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}, \end{aligned} \quad (C68)$$

which is peaked at $q_m = 0$, we make explicit that $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ is peaked at two values of frequency

$$H_n(\mathbf{q}, iq_m) = -I_n(\mathbf{q}, iq_m) + I_n(\mathbf{q}, -iq_m - iq_n) \quad (C69)$$

Using the bosonic Matsubara frequency representation for $I_n(\mathbf{q}, \tau)$ we obtain

$$\begin{aligned} H_n(\mathbf{q}, \tau) = & T \sum_{iq_m} e^{-iq_m \tau} H_n(\mathbf{q}, iq_m) \\ = & -I_n(\mathbf{q}, \tau) + e^{iq_n \tau} I_n(\mathbf{q}, -\tau) \end{aligned} \quad (C70)$$

To compute $I_n(\mathbf{q}, \tau)$ from $I_n(\mathbf{q}, iq_m)$ we use the same procedure as for the previous Fourier transforms over Matsubara frequencies. Using

$$\begin{aligned} D_{inf}(\mathbf{q}, iq_m) &= \frac{d(\mathbf{q})}{(iq_m)^2} \\ \chi_{0inf}(\mathbf{q}, iq_m) &= \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m)^2} \end{aligned} \quad (C71)$$

the asymptotic form for $I_n(\mathbf{q}, iq_m)$ is

$$\begin{aligned} I_n^{inf}(\mathbf{q}, iq_m) = & 3U_{sp} \frac{d(\mathbf{q})}{(iq_m)^2 - \frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})} \\ + & U_{ch} \frac{d(\mathbf{q})}{(iq_m)^2 + \frac{U_{ch}}{2} c(\mathbf{q})} \end{aligned} \quad (C72)$$

Using a complex plane integration and the residue theorem, we get

$$\begin{aligned} I_n^{inf}(\mathbf{q}, \tau) = & 3U_{sp} \frac{d(\mathbf{q})}{2z_{sp}(\mathbf{q})} \left(n_B(-z_{sp}(\mathbf{q})) e^{-z_{sp}(\mathbf{q})\tau} \right. \\ & \left. - n_B(z_{sp}(\mathbf{q})) e^{z_{sp}(\mathbf{q})\tau} \right) \\ + & U_{ch} \frac{d(\mathbf{q})}{2iz_{ch}(\mathbf{q})} \left(n_B(-iz_{ch}(\mathbf{q})) e^{-iz_{ch}(\mathbf{q})\tau} \right. \\ & \left. - n_B(iz_{ch}(\mathbf{q})) e^{iz_{ch}(\mathbf{q})\tau} \right), \end{aligned} \quad (C73)$$

where $n_B(z)$ is the Bose-Einstein distribution and

$$\begin{aligned} z_{sp}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})}, \\ z_{ch}(\mathbf{q}) &= \sqrt{\frac{U_{ch}}{2} c(\mathbf{q})}, \end{aligned} \quad (C74)$$

or, using $n_B(-z) = -e^{\beta z} n_B(z)$,

$$\begin{aligned} I_n^m(\mathbf{q}, \tau) &= \\ &- 3U_{sp} \frac{d(\mathbf{q})}{z_{sp}(\mathbf{q})} n_B(z_{sp}(\mathbf{q})) e^{\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})} \cosh \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right] \\ &- U_{ch} \frac{d(\mathbf{q})}{iz_{ch}(\mathbf{q})} n_B(iz_{ch}(\mathbf{q})) e^{i\frac{\beta}{2} z_{ch}(\mathbf{q})} \cos \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{ch}(\mathbf{q}) \right]. \end{aligned} \quad (C75)$$

Using that result we write, as before, the transform in such a way that it converges quickly

$$\begin{aligned} I_n(\mathbf{q}, \tau) &= T \sum'_{iq_m} e^{-iq_m \tau} [I_n(\mathbf{q}, iq_m) - I_n^m(\mathbf{q}, iq_m)] \\ &\quad + I_n^m(\mathbf{q}, \tau). \end{aligned} \quad (C76)$$

There is however one last difficulty. The asymptotic form Eq.(C72) approaches Eq.(C68) only when both q_m and $q_m + q_n$ are large with respect to the bandwidth. Thus, the frequency range of the finite sum in Eq (C76) has to be chosen such that this condition is satisfied. If q_n is positive, the range of negative q_m must therefore be extended to make sure that, at the cutoff, $q_m + q_n$ is large.

Coming back to expression (C58), using the results (C60) and (C70), the sum over $\bar{1}$ becomes

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{1}} e^{ik_1 \bar{1}} G_n^{(1)}(-\bar{1}) H_n(\bar{1}) &= \\ &\sum_{\mathbf{r}} \int d\tau e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i(k_m + q_n)\tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) \\ &\quad \times [-I_n(\mathbf{r}, \tau) + e^{iq_n \tau} I_n(\mathbf{r}, -\tau)] \\ &= \sum_{\mathbf{r}} \int d\tau e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i k_m \tau} \left[-e^{-iq_n \tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) I_n(\mathbf{r}, \tau) \right. \\ &\quad \left. + G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) I_n(\mathbf{r}, -\tau) \right]. \end{aligned} \quad (C77)$$

For $q_n = 0$, expression (C52) vanishes.

To reach reasonably low temperatures without seeing any finite size effect, we use a system of 512×512 sites and 8192 frequencies. If we were using a brute force approach to compute Eq.(C52) we would have to sum $(8192(512^2))^3 = 9.9 \times 10^{27}$ terms. Assuming we could sum 10^9 terms per second, it would take about 300 billion years to calculate $\chi_{j_x j_x}^{v_2}(iq_n)$ for one value of q_n and thus about 30 000 billion years for a hundred values of q_n . Using the approach described above, this calculation is done in less than 2 days.

Appendix D: Choice of Matsubara frequencies

While all external frequencies are obtained at the same time from the last FFT for the bubble and Maki-Thompson like terms in $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$, this is not the case for the Aslamasov-Larkin like terms Eq.(C52), even in the form of Eq.(C58) that makes maximal use of fast-Fourier transforms. Hence, this term cannot be calculated for thousands of values of q_n , or for the same number as that used in internal Matsubara frequency sums. Therefore we have to compute Eq.(C58) for a reasonable number of carefully chosen frequencies. Assuming that most of the information is in the low frequencies, and that as their magnitude increases it becomes less important to include all the high frequencies, we use the following non-uniform Matsubara frequency index grid. That grid consists of subintervals within which the Matsubara frequencies are equally spaced, with larger space in between Matsubara frequencies at large frequency. The spacing between frequencies in different subintervals increases by powers of 2.

First we define

$N_0 = 2^r$: the last frequency index (cutoff), taken as a power of 2 (r integer),

m : integer that determines how dense the grid is. A large m gives a low density. $0 \leq m < r$,

$N_1 = \frac{N_0}{2^m}$: $N_1 + 1$ is the number of adjacent frequencies close to $n = 0$,

$N_2 = \frac{N_1}{2}$: number of frequencies in each subinterval with a fixed spacing between Matsubara frequencies,

$N = N_1 + mN_2 + 1$: total number of frequencies.

Then the indices of Matsubara frequencies on the grid are given by the following algorithm

$$n(j) = \begin{cases} j, & j = 0, \dots, N_1 - 1, \\ N_1 + 2^{l_j+1} \text{mod}(j - N_1, N_2) + N_1(2^{l_j} - 1), & \\ l_j = \text{floor}\left(\frac{j - N_1}{N_2}\right), & j = N_1, \dots, N - 1. \end{cases} \quad (D1)$$

For example, taking $N_0 = 256$, $m = 5$, so that $N_1 = 8$, $N_2 = 4$ and a total number of frequencies $N = 29$, we obtain the following indices: $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 12, 14, 16, 20, 24, 28, 32, 40, 48, 56, 64, 80, 96, 112, 128, 160, 192, 224, 256$.

With this kind of grid we greatly reduce the number of frequencies for which we have to calculate $\chi_{j_x j_x}^{v_2}$ with Eq.(C58) while retaining the essential information. Note that this also speeds up the analytical continuation with our maximum entropy method described in appendix F.

Appendix E: Fourier transform of a cubic spline

Assume we have the following integral to do

$$f(k) = \int_{x_0}^{x_N} dx g(x) e^{-ikx} \quad (E1)$$

but that we know only $N+1$ discrete values of $g(x_i)$. Let us approximate $g(x)$ in the interval using a cubic spline $S(x)$ defined as

$$S(x) = \begin{cases} S_1(x) & x_0 < x < x_1 \\ S_2(x) & x_1 < x < x_2 \\ \vdots & \\ S_N(x) & x_{N-1} < x < x_N, \end{cases} \quad (\text{E2})$$

where the $S_n(x)$ are cubic polynomials, with the conditions

$$\begin{aligned} S_n(x_{n-1}) &= g(x_{n-1}) \\ S_n(x_n) &= g(x_n) \\ S'_n(x_{n-1}) &= S'_{n-1}(x_{n-1}) \quad n > 1 \\ S''_n(x_{n-1}) &= S''_{n-1}(x_{n-1}) \quad n > 1 \\ S'_1(x_0) &= g'(x_0) \\ S'_N(x_N) &= g'(x_N), \end{aligned} \quad (\text{E3})$$

defining the $4N$ equations necessary to determine the $4N$ coefficients of the spline. The integral (E1) becomes

$$f(k) \approx \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S_n(x) e^{-ikx}. \quad (\text{E4})$$

Integrating by parts we obtain,

$$\begin{aligned} f(k) &= -\frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \left(e^{-ikx} S_n(x) \Big|_{x_{n-1}}^{x_n} \right) \\ &\quad + \frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \\ &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} \\ &\quad + \frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (\text{E5})$$

where we have used the continuity of the spline at the points x_n to eliminate all the intermediate terms in the first sum. Now, if we integrate by parts in the second term and use the continuity of the derivatives $S'_n(x)$ at the points $x = x_n$, we obtain

$$\begin{aligned} f(k) &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} \\ &\quad + \frac{e^{-ikx_0} S'_1(x_0) - e^{-ikx_N} S'_N(x_N)}{(ik)^2} \\ &\quad + \frac{1}{(ik)^2} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S''_n(x) e^{-ikx}. \end{aligned} \quad (\text{E6})$$

Doing it one last time, using the fact that we also have the continuity of the second derivatives $S''_n(x)$ at x_n , we

finally obtain

$$\begin{aligned} f(k) &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} \\ &\quad + \frac{e^{-ikx_0} S'_1(x_0) - e^{-ikx_N} S'_N(x_N)}{(ik)^2} \\ &\quad + \frac{e^{-ikx_0} S''_1(x_0) - e^{-ikx_N} S''_N(x_N)}{(ik)^3} \\ &\quad + \frac{1 - e^{-ik\Delta x}}{(ik)^4} \sum_{n=0}^{N-1} S_{n+1}^{(3)} e^{-ikx_n}, \end{aligned} \quad (\text{E7})$$

where $\Delta x = x_{n+1} - x_n$. The remaining discrete transform can be done using an FFT. The result of this transform will be periodic since it is discrete, but because of the factor $1/(ik)^4$ in front, it will only have a relevant contribution for small k . This periodicity in the sum therefore produces only a very small noise at high k , the remaining discretization noise, that decreases with increasing k . Note that expression (E7) is valid only for $k \neq 0$. For $k = 0$, the result is simply the sum, over all subintervals, of integrals of cubic polynomials with their respective coefficients.

Finally, note that we have chosen to fix the value of the derivatives at the boundaries to complete the system of equations (E3) defining the spline. But other interesting choices are also possible. For example, if we know the coefficients of the terms in $1/(k^2)$ and $1/(k^3)$, i.e. the numerator in the second and third terms of Eq.(E7), fixing those coefficients is a good alternative. In the case where k is a frequency, this choice is convenient because we often know the high frequency expansion from sum rules.

Appendix F: Analytical continuation for the conductivity

Let us start by rewriting the spectral representation for the Matsubara *current-current* correlation function $\chi_{J_x J_x}(iq_n)$,

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(iq_n) &= \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(\omega)}{\omega - iq_n} \\ &= iq_n \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(\omega)}{\omega^2 + q_n^2} + \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega \chi''_{J_x J_x}(\omega)}{\omega^2 + q_n^2}. \end{aligned} \quad (\text{F1})$$

Since $\chi''_{J_x J_x}(\omega)$ is odd,

$$\chi_{J_x J_x}(iq_n) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega \chi''_{J_x J_x}(\omega)}{\omega^2 + q_n^2}. \quad (\text{F2})$$

The real part of the optical conductivity is

$$\sigma^r(\omega) = \frac{\chi''_{J_x J_x}(\omega)}{\omega}, \quad (\text{F3})$$

so that we obtain

$$\chi_{JxJx}(iq_n) = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^2}{\omega^2 + q_n^2} \sigma^r(\omega), \quad (\text{F4})$$

using the fact that the integrand is even. This is our starting point. The objective is to obtain the real part of the conductivity, on the right-hand side, from the Matsubara expression for the susceptibility on the left-hand side. Most analytical continuation is done for imaginary-time data, but not in our case.⁷²

Suppose we could be satisfied with $\sigma^r(\omega)$ on a discrete set of points ω_j . We can use a numerical integration method to approximate the integral (F4), which would then have the form

$$\chi_{JxJx}(iq_n) \approx \sum_j K_{nj} \sigma_j^r \quad (\text{F5})$$

where $\sigma_j^r = \sigma^r(\omega_j)$ and K_{nj} is a $N_{q_n} \times N_\omega$ matrix, N_{q_n} being the size of the vector $\chi_{JxJx}(iq_n)$ and N_ω , the size of the vector σ_j^r . Now, σ_j^r is the quantity we want to determine. If $N_{q_n} = N_\omega$ then σ_j^r is completely determined by the linear system (F5). However, the matrix K_{nj} is ill-conditioned so that a small noise in $\chi_{JxJx}(iq_n)$ would result in a very noisy solution σ_j^r . Also, N_{q_n} is generally smaller than N_ω , the number of real frequencies for which we want to determine $\sigma^r(\omega)$. We therefore need to include more information in the problem to find a unique σ_j^r . The way to do this is to use a maximum entropy approach. In this approach, we minimize the function

$$\chi^2 - \alpha S, \quad (\text{F6})$$

where

$$\begin{aligned} \chi^2 &= \sum_{\{iq_n\}} \left(\frac{\chi_{JxJx}(iq_n) - \sum_j K_{nj} \sigma_j^r}{\epsilon_n} \right)^2 \\ &= \sum_{\{iq_n\}} \left(\frac{\chi_{JxJx}(iq_n) - \bar{\chi}_{JxJx}(iq_n)}{\epsilon_n} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{F7})$$

measures the deviation of $\bar{\chi}_{JxJx}(iq_n) = \sum_j K_{nj} \sigma_j^r$ with respect to $\chi_{JxJx}(iq_n)$, ϵ_n being an estimate of the error of $\chi_{JxJx}(iq_n)$ with respect to the “exact” function. S is the differential entropy defined as

$$S = - \int_0^\infty d\omega \sigma^r(\omega) \ln \frac{\sigma^r(\omega)}{m(\omega)} \quad (\text{F8})$$

where $m(\omega)$ is called the default model. The value of α can be chosen according to different criteria. As is often done, we choose it such that $\chi^2 \approx N_{q_n}$, so that $|\chi_{JxJx}(iq_n) - \bar{\chi}_{JxJx}(iq_n)|$ be equal to ϵ_n on average.

Errors in the numerical evaluation of the integral (F4), i.e. in the definition of K_{nj} in Eq.(F5), are equivalent to having larger errors in the data $\chi_{JxJx}(iq_n)$. Therefore, when Eq.(F6) is minimized to find a solution σ_j^r , this could lead to large errors in σ_j^r with respect to the optimal solution because the inversion of expression (F4)

is an ill-conditioned problem. It is thus clear that the error we make by replacing Eq.(F4) by Eq.(F5) must be smaller than the estimated error ϵ_n on the original data $\chi_{JxJx}(iq_n)$. That is why we need a very accurate numerical integration technique to define K_{nj} . Because we use the spectral representation in Matsubara frequencies, the weight function $\omega^2/(\omega^2 + q_n^2)$ in the integrand of Eq.(F4) is simple and can be integrated analytically. Hence, if we use, for example, a polynomial approximation for $\sigma^r(\omega)$ in a given interval $[\omega_{j-1}, \omega_j]$, the integral can also be done analytically in the interval. If we use a good piecewise polynomial approximation for $\sigma^r(\omega)$, then we can evaluate the integral (F4) precisely.

Maybe the most efficient approach to integrate Eq.(F4) in one dimension is Gaussian quadratures. However, in the latter, both the weights and the grid points depend on the weight function, which in our case depends on q_n . We would therefore need a different grid in ω for each frequency iq_n . This is not possible because we can only search for a unique vector σ_j^r defined on a unique grid ω_j . Another very efficient way of doing the integrals (F4) is to model $\sigma^r(\omega)$ using a cubic spline. This approach allows to use a fixed grid and is very precise because cubic splines are very good to approximate smooth function, which is the case of $\sigma^r(\omega)$. It seems therefore the best approach for our problem. However, to be able to perform the integral (F4) over the whole frequency range $[0, \infty]$, and at the same time reduce the number of frequencies in the grid, which helps speed up the minimization of Eq.(F6), the spline we use is divided into two parts, a low frequency part that is a cubic spline in ω and a high frequency part cubic in $u = 1/\omega$. Then, to make the spline linear system that determines the coefficients well-conditioned, we use a grid that is uniform in ω in the low frequency part and uniform in u in the high frequency part. Finally, integrating analytically in a piecewise manner, keeping the weight function $\omega^2/(\omega^2 + q_n^2)$ intact in the integrand is a great advantage as the temperature decreases since this function then becomes sharper and sharper, and is thus increasingly difficult to integrate numerically. Of course the conductivity $\sigma^r(\omega)$ itself becomes also sharper as T decreases and we have to adjust the grid to resolve its structure. But the numerical integration is still much easier and precise with this approach. We describe below how the K_{nj} is defined and also our choice of grid in ω .

We start with the following representation for $\sigma^r(\omega)$,

$$\begin{aligned} \sigma^r(\omega) = & \begin{cases} s_j(\omega), & \omega_{j-1} \leq \omega \leq \omega_j, & 1 \leq j \leq N \\ s_j(\frac{1}{\omega}), & \omega_{j-1} \leq \omega \leq \omega_j, & N < j \leq N + M, \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{F9})$$

where $s_j(x) = a_j x^3 + b_j x^2 + c_j x + d_j$, with the conditions

$$\begin{aligned} s_j(\omega_{j-1}) &= \sigma_{j-1}^r, \\ s_j(\omega_j) &= \sigma_j^r, \\ s'_j(\omega_{j-1}) &= s'_{j-1}(\omega_{j-1}), \\ s''_j(\omega_{j-1}) &= s''_{j-1}(\omega_{j-1}), \\ s'_1(0) &= 0, \end{aligned} \quad (\text{F10})$$

for $j \leq N$, while

$$\begin{aligned} s_{N+1}\left(\frac{1}{\omega_N}\right) &= \sigma_N^r, \\ s_{N+1}\left(\frac{1}{\omega_{N+1}}\right) &= \sigma_{N+1}^r, \\ s'_{N+1}\left(\frac{1}{\omega_N}\right) &= s'_N(\omega_N), \\ s''_{N+1}\left(\frac{1}{\omega_N}\right) &= s''_N(\omega_N), \end{aligned} \quad (\text{F11})$$

and

$$\begin{aligned} s_j\left(\frac{1}{\omega_{j-1}}\right) &= \sigma_{j-1}^r, \\ s_j\left(\frac{1}{\omega_j}\right) &= \sigma_j^r, \\ s'_j\left(\frac{1}{\omega_{j-1}}\right) &= s'_{j-1}\left(\frac{1}{\omega_{j-1}}\right), \\ s''_j\left(\frac{1}{\omega_{j-1}}\right) &= s''_{j-1}\left(\frac{1}{\omega_{j-1}}\right), \end{aligned} \quad (\text{F12})$$

$$\left. \frac{\partial s_{N+M}\left(\frac{1}{\omega}\right)}{\partial \frac{1}{\omega}} \right|_{\omega=\infty} = 0,$$

for $N+1 < j \leq N+M$. All the derivatives noted with ' and ' ' are taken with respect to ω . The second condition for $j = N+M$ and the last condition in Eq.(F12) make sure that there is no constant and no $1/\omega$ terms in $s_{N+M}(1/\omega)$ so that the integral of the spline converges. Note that this spline is not physically correct for $\omega \rightarrow \infty$ since the moments of $\sigma^r(\omega)$ are not defined. But this does not have any significant importance in the numerical solution if ω_{N+M-1} is chosen large enough.

This spline is very easy to implement. For the low-frequency part of Eq.(F4) we have

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{lf}(iq_n) &= 2 \int_0^{\omega_N} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^2}{\omega^2 + q_n^2} \sigma^r(\omega), \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^N \int_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} d\omega \frac{\omega^2}{\omega^2 + q_n^2} s_j(\omega), \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^N \int_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} d\omega \frac{a_j \omega^5 + b_j \omega^4 + c_j \omega^3 + d_j \omega^2}{\omega^2 + q_n^2}, \end{aligned} \quad (\text{F13})$$

where $\omega_0 = 0$. For $q_n \neq 0$, we obtain

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{lf}(iq_n) &= \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^N \left(\left[\frac{q_n^4}{2} \ln(q_n^2 + \omega^2) - \frac{q_n^2}{2} \omega^2 + \frac{\omega^4}{4} \right]_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} a_j \right. \\ &\quad + \left[q_n^3 \arctan\left(\frac{\omega}{q_n}\right) - q_n^2 \omega + \frac{\omega^3}{3} \right]_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} b_j \\ &\quad + \left[\frac{\omega^2}{2} - \frac{q_n^2}{2} \ln(q_n^2 + \omega^2) \right]_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} c_j \\ &\quad \left. + \left[\omega - q_n \arctan\left(\frac{\omega}{q_n}\right) \right]_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} d_j \right). \end{aligned} \quad (\text{F14})$$

and, for $q_n = 0$,

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{lf}(0) &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^N \int_{\omega_{j-1}}^{\omega_j} d\omega (a_j \omega^3 + b_j \omega^2 + c_j \omega + d_j) \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\omega_j^4 - \omega_{j-1}^4}{4} a_j + \frac{\omega_j^3 - \omega_{j-1}^3}{3} b_j \right. \\ &\quad \left. + \frac{\omega_j^2 - \omega_{j-1}^2}{2} c_j + (\omega_j - \omega_{j-1}) d_j \right) \end{aligned} \quad (\text{F15})$$

The high frequency part of Eq.(F4) is

$$\chi_{jxjx}^{hf}(iq_n) = 2 \int_{\omega_N}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^2}{\omega^2 + q_n^2} \sigma^r(\omega). \quad (\text{F16})$$

Using

$$\omega = \frac{1}{u}, \quad \Rightarrow \quad d\omega = -\frac{1}{u^2} du, \quad (\text{F17})$$

it becomes

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{hf}(iq_n) &= -\frac{2}{\pi} \int_{u_M}^0 du \frac{1}{u^2} \frac{\frac{1}{u^2}}{\frac{1}{u^2} + q_n^2} \sigma^r\left(\frac{1}{u}\right) \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{u_M} du \frac{1}{u^2 + u^4 q_n^2} \sigma^r\left(\frac{1}{u}\right), \end{aligned} \quad (\text{F18})$$

where $u_M = 1/\omega_N$. Now, with Eq.(F9), we have

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{hf}(iq_n) &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^M \int_{u_{j-1}}^{u_j} du \frac{1}{u^2 + u^4 q_n^2} s_j(u) \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^M \int_{u_{j-1}}^{u_j} du \frac{\alpha_j u^3 + \beta_j u^2 + \gamma_j u + \delta_j}{u^2 + u^4 q_n^2}, \end{aligned} \quad (\text{F19})$$

where $1 \leq j \leq M$, $u_0 = 0$, and we have used a different notation for the coefficients to match their indices with

those of grid points in u , which are indexed in order of decreasing ω . For $q_n \neq 0$, we obtain

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{hf}(iq_n) = & \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^M \left(\left[\frac{1}{2q_n^2} \ln(1 + q_n^2 u^2) \right]_{u_{j-1}}^{u_j} \alpha_j \right. \\ & \left[\frac{1}{q_n} \arctan(q_n u) \right]_{u_{j-1}}^{u_j} \beta_j \\ & \left[\ln(u) - \frac{1}{2} \ln(1 + q_n^2 u^2) \right]_{u_{j-1}}^{u_j} \gamma_j \\ & \left. \left[-\frac{1}{u} - q_n \arctan(q_n u) \right]_{u_{j-1}}^{u_j} \delta_j \right), \quad (\text{F20}) \end{aligned}$$

and, for $q_n = 0$,

$$\begin{aligned} \chi_{jxjx}^{hf}(0) = & \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^M \int_{u_{j-1}}^{u_j} du \left(\alpha_j u + \beta_j + \frac{\gamma_j}{u} + \frac{\delta_j}{u^2} \right) \\ = & \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^M \left[\frac{u_j^2 - u_{j-1}^2}{2} \alpha_j + (u_j - u_{j-1}) \beta_j \right. \\ & \left. + \left(\ln \frac{u_j}{u_{j-1}} \right) \gamma_j + \left(\frac{1}{u_{j-1}} - \frac{1}{u_j} \right) \delta_j \right]. \quad (\text{F21}) \end{aligned}$$

Note that $\gamma_1 = 0$ and $\delta_1 = 0$, so that this expression has no problem with $u = 0$.

The spline coefficients for the complete spline are obtained at the same time for both the low frequency and high frequency parts using the conditions (F10), (F11) and (F12). Because the spline has two parts made of polynomials in ω and $u = 1/\omega$, one must define the spline linear system for that particular case, but this is a rather straightforward task. Note that, for the high frequency part, the condition of continuity of the first derivatives with respect to u or ω are the same, but that is not true for the continuity of the second derivatives. However, we do not observe any loss of accuracy if the continuity of the second derivatives with respect to u instead of ω is used.

The conditions (F10), (F11) and (F12), put in matrix form are written as $Av = \bar{\sigma}$, where v is a vector containing the spline coefficients and $\bar{\sigma}$ is a vector containing the values σ_j^r (that are repeated) and zeros otherwise. We want to obtain the coefficients as linear forms of the vector σ^r . For that we have to invert the matrix A and first obtain a linear form for v . The first two lines of the condition (F10) tell us that $\bar{\sigma}$ contains the elements σ_j^r repeated twice each, except for σ_0^r , and the other elements of $\bar{\sigma}$ are zeros. So if we define the matrix $P_{A\sigma}$ that sum up the pairs of columns in A^{-1} corresponding to the same σ_j^r and removes all columns that correspond to zeros in $\bar{\sigma}$ we get

$$\begin{aligned} v &= A^{-1} P_{A\sigma} \sigma^r \\ &= T_{v\sigma} \sigma^r \end{aligned} \quad (\text{F22})$$

Then the vectors formed with the coefficients are given by expressions like

$$a = P_a v, \quad b = P_b v, \quad \dots \quad (\text{F23})$$

where P_a extracts a column formed of all the coefficients of the cubic terms, P_b the coefficients of the quadratic terms, etc. Now, expressions (F14) and (F15) have the matrix form

$$\chi_{jxjx}^{lf}(iq_n) = \frac{2}{\pi} \left(\bar{K}_n^a a + \bar{K}_n^b b + \bar{K}_n^c c + \bar{K}_n^d d \right), \quad (\text{F24})$$

which becomes, using Eq.(F23) and Eq.(F22),

$$\chi_{jxjx}^{lf}(iq_n) = \frac{2}{\pi} \left(\bar{K}_n^a P_a + \bar{K}_n^b P_b + \bar{K}_n^c P_c + \bar{K}_n^d P_d \right) T_{v\sigma} \sigma^r. \quad (\text{F25})$$

Similarly, if we define the projectors for the vectors α , β , γ and δ , then Eq.(F20) and Eq.(F21) take the form

$$\chi_{jxjx}^{hf}(iq_n) = \frac{2}{\pi} \left(\bar{K}_n^\alpha P_\alpha + \bar{K}_n^\beta P_\beta + \bar{K}_n^\gamma P_\gamma + \bar{K}_n^\delta P_\delta \right) T_{v\sigma} \sigma^r. \quad (\text{F26})$$

Summing Eq.(F25) and Eq.(F26) we obtain

$$\chi_{jxjx}(iq_n) = K_n \sigma^r, \quad (\text{F27})$$

with

$$\begin{aligned} K_n = & \frac{2}{\pi} \left(\bar{K}_n^a P_a + \bar{K}_n^b P_b + \bar{K}_n^c P_c + \bar{K}_n^d P_d \right. \\ & \left. + \bar{K}_n^\alpha P_\alpha + \bar{K}_n^\beta P_\beta + \bar{K}_n^\gamma P_\gamma + \bar{K}_n^\delta P_\delta \right) T_{v\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{F28})$$

To conclude this section, a few other points must be addressed. First, the form of expression (F14) becomes numerically unstable when q_n/ω are large. For example, the first two terms in the high q_n/ω expansion of $\frac{q_n^4}{2} \ln(q_n^2 + \omega^2)$ in \bar{K}_n^a cancel out the terms $-\frac{q_n^2}{2} \omega^2$ and $\frac{\omega^4}{4}$. When q_n/ω increases, the magnitude of those terms becomes much larger than \bar{K}_n^a itself so that if one computes numerically the three terms of \bar{K}_n^a separately and then adds them, the finite precision error becomes larger than the true result. To overcome this problem one simply has to use the large q_n/ω expansion of \bar{K}_n^a starting at a certain cutoff, instead of directly the form appearing in Eq.(F14). The same kind of cancelation appears in the other terms of Eq.(F14) so that the large q_n/ω expansions must be used for those terms as well. In the case of Eq.(F20) it is when $q_n u$ is small that some simplifications occur when replacing the expressions by their expansions, which will also improve the accuracy of the numerical result.

Second, since we invert the spline matrix A to define $T_{\omega\sigma}$ in Eq.(F22), it is preferable that this matrix be well-conditioned. For that purpose we define our grid to be uniform in ω for the low frequency part of the spline and uniform in u for the high frequency part. The grid in u is

$$u = 0, \frac{1}{\omega_{N+M-1}}, \frac{1}{\omega_{N+M-2}}, \dots, \frac{1}{\omega_N}. \quad (\text{F29})$$

If $u_j - u_{j-1}$ is constant we have

$$\omega_{N+M-2} = \frac{\omega_{N+M-1}}{2}, \quad \omega_{N+M-3} = \frac{\omega_{N+M-1}}{3}, \dots, \quad \omega_N = \frac{\omega_{N+M-1}}{M}, \quad (\text{F30})$$

or

$$\omega_{N+1} = \frac{M\omega_N}{M-1}, \quad \omega_{N+2} = \frac{M\omega_N}{M-2}, \dots, \quad \omega_{N+M-1} = M\omega_N. \quad (\text{F31})$$

Also, to have a density of points ω_j that varies continuously when we change from high to low frequency, we assume that $\omega_{N+1} - \omega_N = \omega_N - \omega_{N-1}$. Defining $\Delta\omega_{lf} = \omega_N - \omega_{N-1}$, we have

$$\frac{M\omega_N}{M-1} - \omega_N = \Delta\omega_{lf}, \quad (\text{F32})$$

so that

$$M = \frac{\omega_N}{\Delta\omega_{lf}} + 1 \quad (\text{F33})$$

and, if $\omega_j - \omega_{j-1}$ is constant for $j \leq N$,

$$\Delta\omega_{lf} = \frac{\omega_N}{N}, \quad (\text{F34})$$

so that $M = N + 1$. Note that when choosing ω_N and N , we have to check that the last frequency $\omega_{N+M-1} = (N+1)\omega_N$ is large enough while not so large that it would uselessly make the calculation heavy. To further improve the conditioning of the matrix A , we use normalized frequencies $\omega'_j = \omega_j/\omega_N$ so that $\omega'_N = 1$ and $u'_M = 1$. In the j^{th} interval, if a'_j, b'_j, c'_j et d'_j are the coefficients in the normalized grid, we have

$$\begin{aligned} \sigma^r(\omega_j) &= a_j\omega_j^3 + b_j\omega_j^2 + c_j\omega_j + d_j, \\ &= a'_j\frac{\omega_j^3}{\omega_N^3} + b'_j\frac{\omega_j^2}{\omega_N^2} + c'_j\frac{\omega_j}{\omega_N} + d'_j, \end{aligned} \quad (\text{F35})$$

and therefore,

$$a_j = \frac{a'_j}{\omega_N^3}, \quad b_j = \frac{b'_j}{\omega_N^2}, \quad c_j = \frac{c'_j}{\omega_N}, \quad d_j = d'_j. \quad (\text{F36})$$

Finally, for the high frequency part of the spline, we have

$$\alpha_j = \omega_N^3\alpha'_j, \quad \beta_j = \omega_N^2\beta'_j, \quad \gamma_j = \omega_N\gamma'_j, \quad \delta_j = \delta'_j. \quad (\text{F37})$$

To end this section, we comment on the differential entropy and the minimization procedure. For the differential entropy (F8), we use a default model that is almost flat in the region where $\sigma^r(\omega)$ is expected to have its main structure, and that decreases gradually to very small values for frequencies much larger than the bandwidth. This ensures that the solution that we find is as unbiased as possible. The minimization of Eq.(F6) is performed using a Matlab routine called *fmincon*, which uses a Trust-Region-Reflective algorithm that has been proven quite efficient with not as much tendency to get trapped into local minima as other optimization routines. Our procedure is to start with a very large value of α such that the minimization process gives a solution very close to the default model $m(\omega)$ (the minimization of Eq.(F8) alone has in fact a solution proportional to $m(\omega)$). Then, α is decreased and a new optimal solution is found, using the previous solution as a starting point in the optimization routine. This step is then repeated until $\chi^2 \approx N_{q_n}$ or χ^2 does not decrease anymore when α is reduced. Using an augmented lagrangian method, we also include inequality constraints to restrict the roughness of the solution $\sigma^r(\omega_j)$. This roughness appears at some point in the procedure when we try to make $K_n\sigma^r$ closer to $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$. It is related to oscillations present in K_{nj} as a function of the frequency index j for a given n . Those oscillations are in fact the price to pay to work with an accurate numerical integration method since they are present in all approximations more sophisticated than a piecewise linear function for $\sigma^r(\omega)$ in the numerical integration (think about the unequal weights in a Simpson 1/3 or in gaussian quadratures). In fact, the oscillations in our K_{nj} have an extremely small relative amplitude, but they appear greatly amplified in the solution $\sigma^r(\omega_j)$ when the relative distance $|\chi_{j_x j_x}(iq_n) - K_n\sigma^r|$ becomes very small. The link between oscillations in $\sigma^r(\omega_j)$ and oscillations in K_{nj} for n fixed is clear because they are correlated in the two functions. So they are not related to noise in the data $\chi_{j_x j_x}(iq_n)$. However, those inequality constraints are not absolutely necessary to obtain good, quantitative, results with our approach. They just ensure that $\sigma^r(\omega_j)$ is a smooth function.

- * dominic.bergeron@usherbrooke.ca
† tremblay@physique.usherbrooke.ca
- ¹ P. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987)
 - ² B. J. Powell and R. H. McKenzie, *J. Phys. Cond. Mat.* **18**, R827 (2006)
 - ³ H. Nakano and M. Imada, *Journal of the Physical Society of Japan* **68**, 1458 (1999/04/)
 - ⁴ T. Tohyama, Y. Inoue, K. Tsutsui, and S. Maekawa, *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* **72**, 45113 (2005/07/15)
 - ⁵ E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, J. Riera, and D. Scalapino, *Physical Review B (Condensed Matter)* **45**, 10107 (1992/05/01)
 - ⁶ J. Riera and E. Dagotto, *Physical Review B (Condensed Matter)* **50**, 452 (1994/07/01)
 - ⁷ W.-Z. Li, F. Chen, T.-F. Xu, and H.-P. Ying, *Communications in Theoretical Physics* **22**, 273 (1994/10/30)
 - ⁸ D. J. Scalapino, S. R. White, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2830 (May 1992)
 - ⁹ A. Comanac, L. De' Medici, M. Capone, and A. J. Millis, *Nat. Phys.* **4**, 287 (Apr 2008)
 - ¹⁰ S. Chakraborty, D. Galanakis, and P. Phillips, *Phys. Rev. B* **78**, 212504 (Dec 2008)
 - ¹¹ F. Mancini and A. Avella, *Advances in Physics* **53**, 537 (2004)
 - ¹² T. A. Maier, *ArXiv Condensed Matter e-prints* (Dec 2003), arXiv cond-mat/0312447
 - ¹³ M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, and H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B* **61**, 12739 (2000)
 - ¹⁴ K. Haule and G. Kotliar, *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* **76**, 104509 (2007)
 - ¹⁵ K. Haule and G. Kotliar, *Europhysics Letters* **77**, 6 pp (2007/01/), ISSN 0295-5075
 - ¹⁶ N. Lin, E. Gull, and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **80**, 161105 (Oct 2009), arXiv 0909.1625 [cond-mat.str-el]
 - ¹⁷ S. Okamoto, D. Sénéchal, M. Civelli, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **82**, 180511 (Nov 2010)
 - ¹⁸ G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001)
 - ¹⁹ T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Reviews of Modern Physics* **77**, 1027 (2005)
 - ²⁰ G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Reviews of Modern Physics* **78**, 865 (2006)
 - ²¹ T. Moriya, Y. Takahashi, and K. Ueda, *Journal of the Physical Society of Japan* **59**, 2905 (1990/08)
 - ²² R. Hlubina and T. Rice, *Physical Review B (Condensed Matter)* **51**, 9253 (1995/04/01)
 - ²³ A. Rosch, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4280 (May 1999)
 - ²⁴ H. v. Lohneysen, A. Rosch, M. Vojta, and P. Wolfe, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1015 (Aug 2007)
 - ²⁵ S. Wermbter and L. Tewordt, *Phys. Rev. B* **48**, 10514 (Oct 1993)
 - ²⁶ T. Dahm, L. Tewordt, and S. Wermbter, *Physical Review B (Condensed Matter)* **49**, 748 (1994/01/01)
 - ²⁷ H. Kontani, *Journal of the Physical Society of Japan* **76**, 074707 (2007/07)
 - ²⁸ H. Kontani, K. Kanki, and K. Ueda, *Physical Review B (Condensed Matter)* **59**, 14723 (1999/06/01)
 - ²⁹ Y. Yanase, *Journal of the Physical Society of Japan* **71**, 278 (2002/01/)
 - ³⁰ H. Kontani, *Reports on Progress in Physics* **71**, 026501 (2008/02/)
 - ³¹ H. Maebashi and H. Fukuyama, *Journal of the Physical Society of Japan* **66**, 3577 (1997/11/)
 - ³² H. Maebashi and H. Fukuyama, *Journal of the Physical Society of Japan* **67**, 242 (1998/01/)
 - ³³ Y. M. Vilk, L. Chen, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **49**, 13267 (1994)
 - ³⁴ Y. Vilk and A.-M. Tremblay, *J. Phys. I (France)* **7**, 1309 (1997)
 - ³⁵ S. Allen, A.-M. Tremblay, and Y. M. Vilk, in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, edited by D. Sénéchal, C. Bourbonnais, and A.-M. Tremblay (2003) arXiv cond-mat/0110130
 - ³⁶ A.-M. Tremblay, *Theoretical methods for Strongly Correlated Systems* (Springer series, 2011)
 - ³⁷ N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (Nov 1966)
 - ³⁸ P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (Jun 1967)
 - ³⁹ Y. Vilk and A.-M. Tremblay, *J. Phys. Chem. Solids (UK)* **56**, 1769 (1995)
 - ⁴⁰ S. Moukouri, S. Allen, F. Lemay, B. Kyung, D. Poulin, Y. M. Vilk, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **61**, 7887 (2000)
 - ⁴¹ B. Kyung, V. Hankevych, A.-M. Dare, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147004 (2004)
 - ⁴² N. Bickers and D. Scalapino, *Ann. Phys. (USA)* **193**, 206 (1989)
 - ⁴³ N. E. Bickers, D. J. Scalapino, and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 961 (1989)
 - ⁴⁴ T. Moriya and K. Ueda, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 1299 (2003)
 - ⁴⁵ G. G. Lonzarich and L. Taillefer, *J. Phys. C* **18**, 4339 (1985)
 - ⁴⁶ T. Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism* (Springer-Verlag, Berlin, 1985)
 - ⁴⁷ I. Dzyaloshinski, *Sov. Phys. JETP* **66**, 848 (1987)
 - ⁴⁸ H. J. Schulz, *Europhys. Lett.* **4**, 609 (1987)
 - ⁴⁹ P. Lederer, G. Montambaux, and D. Poilblanc, *J. Phys.* **48**, 1613 (1987)
 - ⁵⁰ C. Honerkamp and M. Salmhofer, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 187004 (2001)
 - ⁵¹ M. A. Tusch, Y. H. Szczec, and D. E. Logan, *Phys. Rev. B* **53**, 5505 (Mar 1996)
 - ⁵² E. Motoyama, G. Yu. I. Vishik, O. Vajk, P. Mang, and M. Greven, *Nature* **445**, 186 (2007)
 - ⁵³ A. F. Veilleux, A.-M. Dare, L. Chen, Y. M. Vilk, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **52**, 16255 (1995)
 - ⁵⁴ B. Kyung, J. S. Landry, D. Poulin, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 099702 (2003)
 - ⁵⁵ A. M. S. Tremblay, B. Kyung, and D. Senechal, *Low Temp. Phys.* **32**, 424 (2006)
 - ⁵⁶ G. Baym, *Physical review* **127**, 1391 (1962)
 - ⁵⁷ L. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, 1962)
 - ⁵⁸ I. Paul and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **67**, 115131 (Mar 2003), arXiv cond-mat/0211538
 - ⁵⁹ Y. Vilk and A.-M. Tremblay, *Europhys. Lett.* **33**, 159 (1996)
 - ⁶⁰ P. C. Martin and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **115**, 1342 (Sep 1959)
 - ⁶¹ J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, 1417 (Jun 1960)

- 1960)
- ⁶² M R Hedeyati and G Vignale, *Phys Rev B* **40**, 9044 (1989)
 - ⁶³ G Mahan *Many-Particle Physics, 3rd edition, Section 6.4.4* (Kluwer/Plenum, 2000)
 - ⁶⁴ N F Berk and J R Schrieffer, *Phys Rev Lett* **17**, 433 (Aug 1966)
 - ⁶⁵ A Larkin and A Varlamov, *ArXiv Condensed Matter e-prints*(Sep 2001), *arXiv cond-mat/0109177*
 - ⁶⁶ K Maki, *Progress of Theoretical Physics* **39** 897 (1968)
 - ⁶⁷ K Maki, *Progress of Theoretical Physics* **40** 193 (1968)
 - ⁶⁸ K Maki, *Journal of Low Temperature Physics* **1**, 513 (1969)
 - ⁶⁹ R S Thompson, *Phys Rev B* **1** 327 (Jan 1970)
 - ⁷⁰ L Aslamasov and A Larkin, *Physics Letters A* **26** 238 (1968)
 - ⁷¹ V S Oudovenko and G Kotliar, *Phys Rev B* **65**, 075102 (2002/02/15)
 - ⁷² M Jarrell and J E Gubernatis, *Physics Reports* **269**, 133 (1996)
 - ⁷³ K S D Beach, R J Gooding, and F Marsiglio, *Phys Rev B* **61**, 5147 (Feb 2000)
 - ⁷⁴ S Roy and A -M S Tremblay, *Europhys Lett* **84**, 37013 (2008)
 - ⁷⁵ A -M Daré, Y M Vilk, and A -M S Tremblay, *Phys Rev B* **53**, 14236 (1996)
 - ⁷⁶ Y Onose, Y Taguchi, K Ishizaka, and Y Tokura, *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* **69**, 24504 (2004/01/01)
 - ⁷⁷ A Zimmers, J Tomczak, R Lobo, N Bontemps, C Hill, M Bari Y Dagan, R Greene, A Millis, and C Homes, *Europhysics Letters* **70**, 225 (2005/04/15)
 - ⁷⁸ T Moriya and K Ueda, *Advances in Physics* **49**, 555 (2000/07)
 - ⁷⁹ B Kyung J -S Landry, and A M S Tremblay, *Phys Rev B* **68**, 174502 (2003)
 - ⁸⁰ V Hankevych, B Kyung, A -M Daré, D Senéchal, and A -M Tremblay in *Proceedings of SNS2004* (2005) *cond-mat/0407085*
 - ⁸¹ D Bergeron *Conductivité dans le modèle de Hubbard bidimensionnel à faible couplage*, Ph D thesis, Université de Sherbrooke (2011)
 - ⁸² A Kaminski, S Rosenkranz, H M Fretwell, Z Z Li, H Raffy, M Randeria, M R Norman, and J C Campuzano, *Phys Rev Lett* **90**, 207003 (May 2003)
 - ⁸³ N E Hussey, *Journal of Physics Condensed Matter* **20**, 123201 (2008)
 - ⁸⁴ R A Cooper, Y Wang, B Vignolle, O J Lipscombe, S M Hayden, Y Tanabe, T Adachi, Y Koike, M Nohara, H Takagi, C Proust, and N E Hussey, *Science* **323** 603 (2009), <http://www.sciencemag.org/content/323/5914/603.full.pdf>
 - ⁸⁵ N Doiron-Leyraud, P Auban-Senzier, S R de Cotret, A Sedeki C Bourbonnais, D Jerome, K Bechgaard, and L Taillefer, *ArXiv e-prints*(May 2009), *arXiv 0905.0964 [cond-mat sup-con]*
 - ⁸⁶ N Doiron-Leyraud, P Auban-Senzier, S René de Cotret, C Bourbonnais, D Jérôme, K Bechgaard, and L Taillefer, *Phys Rev B* **80**, 214531 (Dec 2009)
 - ⁸⁷ M Abdel-Jawad, J G Analytis, L Balicas, A Carrington, J P H Charmant, M M J French and N E Hussey, *Physical Review Letters* **99**, 107002 (7 Sept 2007)
 - ⁸⁸ Y Ando, S Komiyama, K Segawa, S Ono, and Y Kurita, *Physical Review Letters* **93**, 267001 (2004/12/31)
 - ⁸⁹ H Terletska, J Vučković, D Tanasković, and V Dobrosavljević *ArXiv e-prints*(Dec 2010), *arXiv 1012.5833 [cond-mat str-el]*
 - ⁹⁰ A -M Daré, L Chen, and A -M S Tremblay, *Phys Rev B* **49**, 4106 (Feb 1994)
 - ⁹¹ G Mahan, *Many-Particle Physics* (Kluwer Academic, 2000)

Chapitre 3

Complément aux résultats de l'article

Dans la discussion de l'article, il est mentionné que, dans le régime critique quantique, la surface de Fermi est complètement incohérente, c'est-à-dire que la fonction spectrale est large en vecteur d'onde partout au niveau de Fermi. Cela explique pourquoi il n'y a aucun effet de court-circuitage de points chauds par des points froids, ce qui produirait une résistivité en T^2 plutôt que la résistivité linéaire en T observée. D'autre part, il est aussi mentionné que le comportement en température de la résistivité à gauche du point critique près et sous la température de pseudogap dépend des paramètres de bande, ce qui est important si l'on veut expliquer les différences observées entre les différents cuprates dans ce régime. Les résultats des deux prochaines sous-sections appuient les commentaires de l'article sur ces questions. La première de ces sous-sections permet aussi de comprendre d'avantage l'effet des corrélations en fonction du dopage, alors que la seconde apporte un point de vue un peu plus général sur le comportement de la résistivité en fonction de la température et du dopage en montrant des résultats avec sauts aux voisins plus éloignés.

3.1 Taux de diffusion et fonction spectrale

Afin de comprendre la forme qualitative des courbes de conductivité optique montrées à la figure 3 du chapitre précédent, on peut tracer la distribution en énergie de la densité spectrale à une particule le long de certains segments de la zone de Brillouin. Cette fonction peut être obtenue par le prolongement analytique de la fonction de Green de Matsubara en utilisant des approximants de Padé. La figure (3.1) montre la den-

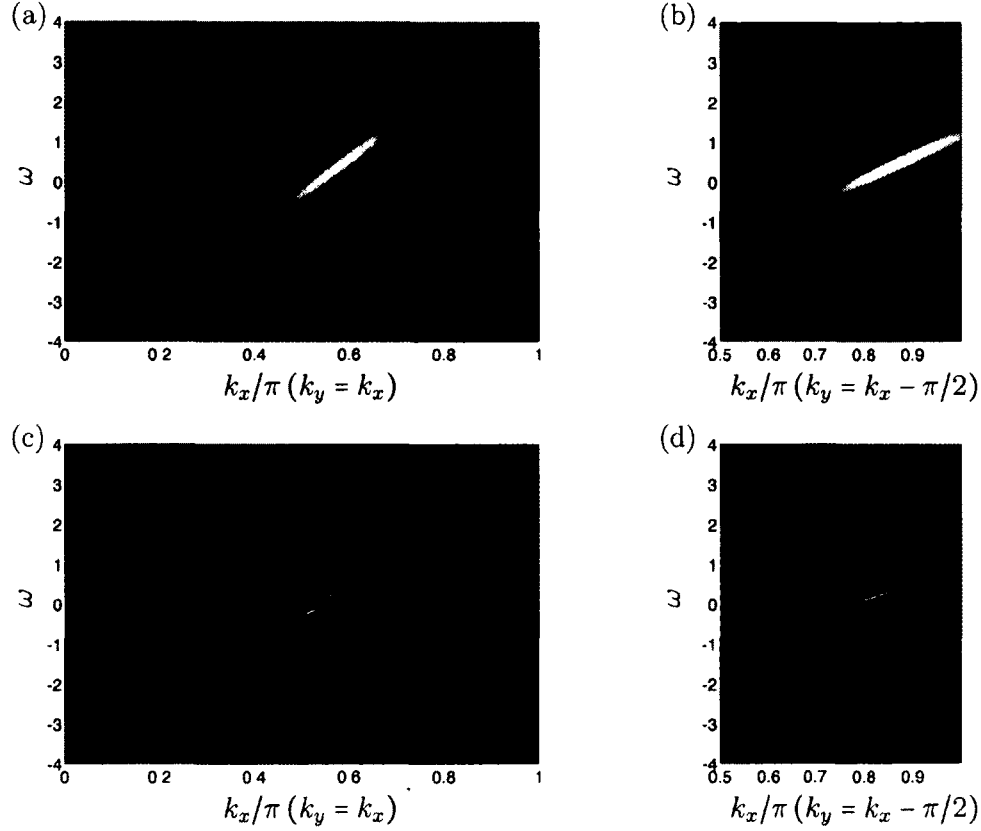


FIGURE 3.1 – Distribution en énergie de $A(\mathbf{k}, \omega)$ à la densité $n = 1.17$ pour les segments $\mathbf{k} = (0, 0) \rightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ et $\mathbf{k} = (\pi/2, 0) \rightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi/2)$ à $T = 0.2t$ pour (a) et (b) et $T = 0.04t$ pour (c) et (d).

sité spectrale pour un dopage à gauche du point critique au-dessus et en-dessous de la température de pseudogap T^* pour deux segments de la zone de Brillouin. À haute température, on comprend bien à partir des figures (3.1)(a) et (b), pourquoi la conductivité optique, Fig. 3(a) de l'article, ne comporte qu'un seul pic très large autour de $\omega = 0$. Sous T^* , Figs.(3.1)(c) et (d), on observe l'apparition de "bandes interdites" à deux endroits. L'apparition de ces bandes interdites est dû à la diffusion des quasi-particules sur les fluctuations d'onde de densité de spin. De plus, dans cette région du diagramme de phase, ces fluctuations sont incommensurables pour les paramètres utilisés et c'est pourquoi deux bandes interdites apparaissent. Le taux de diffusion de la figure (3.6)(a), dont la forme est expliquée à la fin de cette sous-section, permet de comprendre l'origine de ces deux

bandes interdites sous T^* . La présence de la bande interdite à $\omega = 0$ près de $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ explique pourquoi on obtient un pic centré environ à $\omega = 0.5t$ dans la conductivité sur la figure 3(d) de l'article. La seconde structure, qui forme une "épaule" dans la conductivité sans correction de vertex et une bosse, avec corrections, est due aux transitions entre la bande incohérente inférieure et la bande relativement étroite située au-dessus de $\omega = 0$.

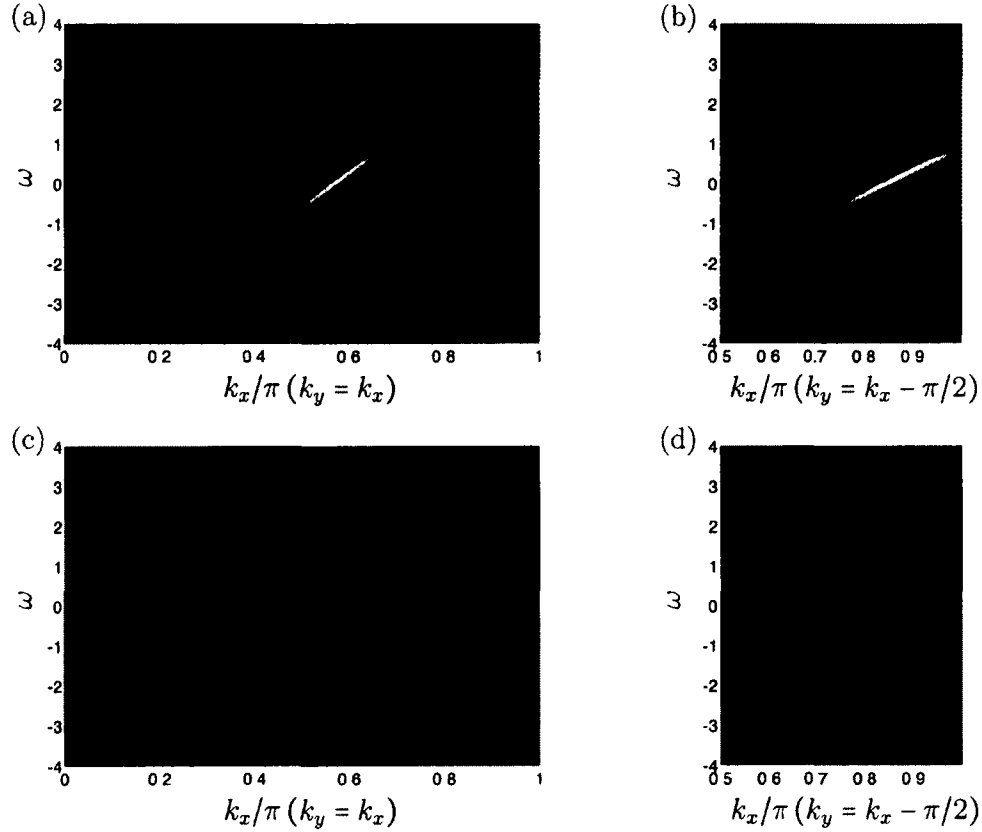


FIGURE 3.2 – Distribution en énergie de $A(\mathbf{k}, \omega)$ à la densité $n = 1.32$ pour les segments $\mathbf{k} = (0, 0) \rightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ et $\mathbf{k} = (\pi/2, 0) \rightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi/2)$ à $T = 0.2t$ pour (a) et (b) et $T = 0.05t$ pour (c) et (d).

Les figures (3.2)(a) à (d) montrent la distribution en énergie de la densité spectrale à haute et basse température à droite du point critique pour les mêmes segments de la zone de Brillouin que sur la figure (3.1). Ces figures aident à comprendre l'allure des courbes de conductivité optique montrées aux figures 3(g) et 3(h) de l'article et composées essentiellement d'un pic centré à $\omega = 0$. À haute température, le pic est large, quoique

plus étroit qu'aux dopages plus près du point critique, alors qu'il est très étroit et intense à basse température. Par contre les représentations (3.2)(c) et (d) ne permettent pas de comprendre la partie à haute fréquence du spectre à basse température (Fig.3(h) de l'article) puisque son intensité est trop faible par rapport au pic principal (1000 fois plus faible), du fait que l'intensité de la partie incohérente du spectre à une particule est extrêmement faible par rapport à la partie très étroite au voisinage de $\omega = 0$. Les spectres

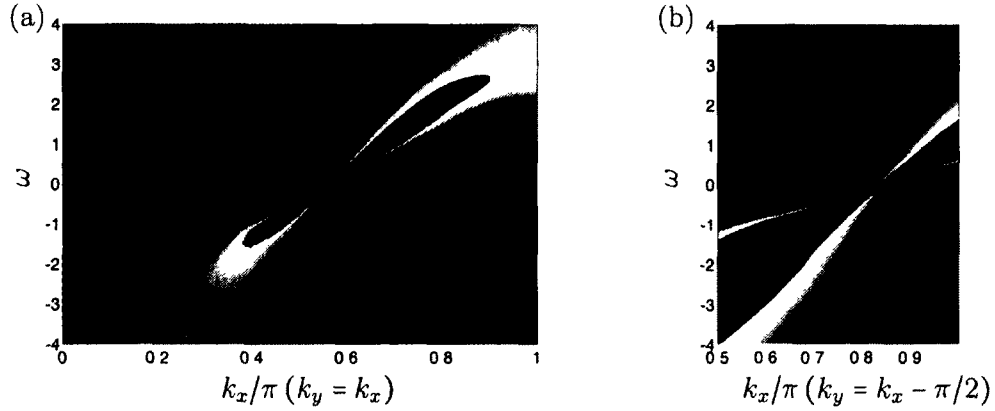


FIGURE 3.3 – Distribution en énergie de $A(\mathbf{k}, \omega)$ à la densité $n = 1.32$ pour les segments $\mathbf{k} = (0, 0) \rightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi)$ et $\mathbf{k} = (\pi/2, 0) \rightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi/2)$ à $T = 0.01t$. Seul les valeurs $A(\mathbf{k}, \omega)$ plus faible que 0.2% de la valeur maximale de $A(\mathbf{k}, \omega)$ sont conservées. Le trait fin blanc indique la position du maximum de $A(\mathbf{k}, \omega)$ pour chaque \mathbf{k} .

montrés aux figures (3.2)(c) et (d) sont ceux obtenus à une température plus élevée que celle de la figure 3(h) de l'article car, à une telle température, le spectre est trop étroit et intense pour que cette représentation soit utile. Par contre, on peut observer la partie incohérente du spectre à plus basse température sur la figure (3.3), où seules les valeurs plus faibles que 0.2% de la valeur maximale de $A(\mathbf{k}, \omega)$ ont été conservées. On constate que des transitions sont possibles entre la partie cohérente du spectre à $\omega < 0$ et la partie incohérente à $\omega > 0$ et *vice versa*. Ce sont ces transitions que l'on observe dans la partie de droite de la figure 3(h) de l'article.

D'autre part, les figures 3.4 et 3.5 montrent l'évolution en fonction du dopage du taux de diffusion dû aux interactions *électron-électron* et de la densité spectrale au niveau de Fermi, toujours pour l'Hamiltonien avec sauts aux plus proches voisins seulement. Ces résultats sont obtenus par le prolongement analytique de la self-énergie par un simple lissage polynomial sur les quelques premières fréquences de Matsubara, ce qui est suffisant

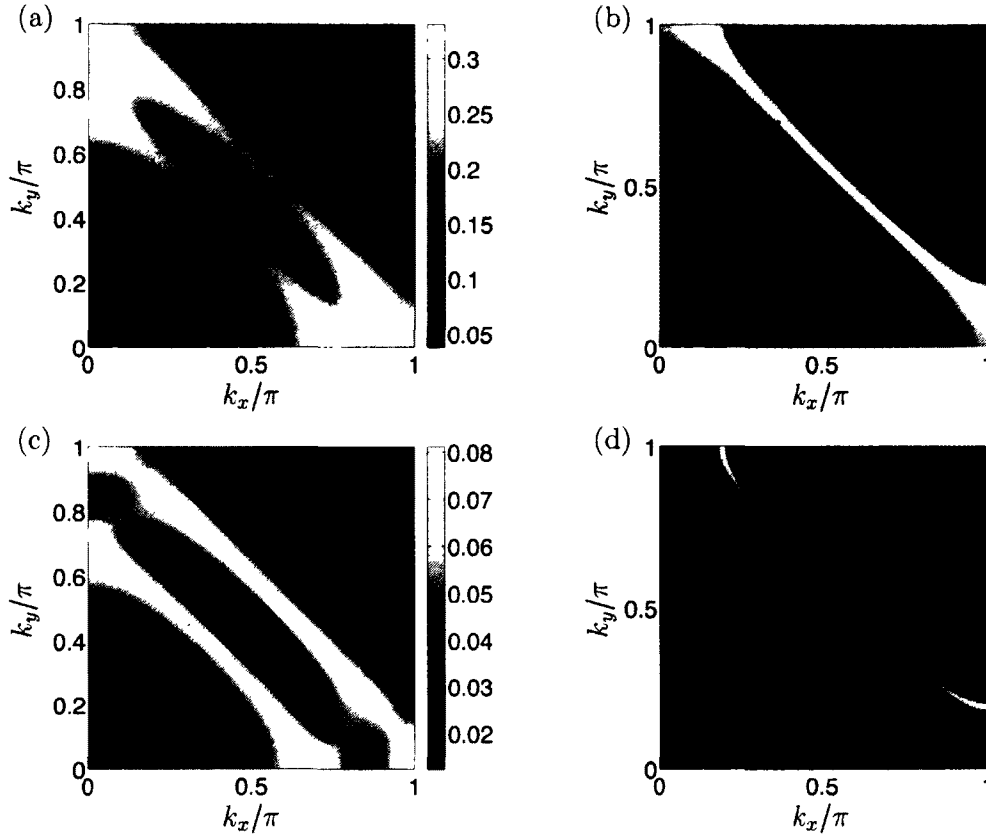


FIGURE 3.4 – (a) $-\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}, \omega = 0)$ et (b) $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ dans le quart de la zone de Brillouin au dopage $p = 0.17$ et à la température $T = 0.1t$ (400K) (au-dessus de la température de pseudogap) et (c) $-\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}, \omega = 0)$ et (d) $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$, pour $p = 0.2$ (près du point critique) et $T = 0.06t$ (240K).

pour obtenir des résultats qualitatifs en fonction du vecteur d'onde. Les résultats sont montrés pour des dopages en électrons, c'est pourquoi la surface de Fermi est centrée sur le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. Le type de dopage n'a toutefois pas d'importance ici puisque l'Hamiltonien est invariant (à une constante près) par rapport à une transformation *particule-trou*. On remarque que, pour le dopage $p = 0.17$ au-dessus de la température de pseudogap, figure 3.4(a) et (b), la surface de Fermi, en (b), est très incohérente, sans point froid. Lorsque le dopage augmente, d'après les figures 3.4(b) et (d) et 3.5(b) et (d), la surface de Fermi devient graduellement cohérente et ce, de façon plus ou moins uniforme. Entre autre, près du point critique autour de $p = 0.2$, il n'y a aucun point froid dont le

taux de diffusion serait purement T^2 , mais seulement des points chauds dont le taux de diffusion a, d'après les courbes de résistivité, la forme $AT + BT^2$, avec un coefficient A qui diminue avec le dopage.

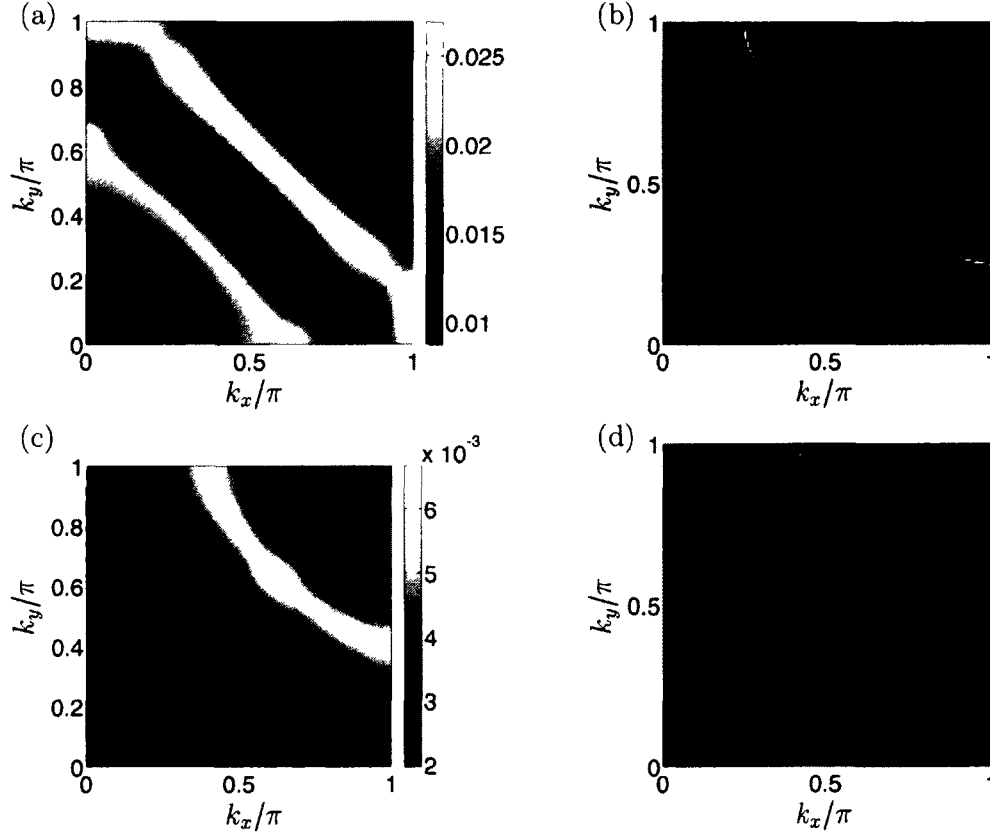


FIGURE 3.5 – (a) $-\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega = 0)$ et (b) $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ dans le quart de la zone de Brillouin au dopage $p = 0.26$ et à la température $T = 0.06t$ (240K) et (c) $-\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega = 0)$ et (d) $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$, pour $p = 0.5$ et $T = 0.06t$, deux dopages à droite du point critique.

D'autre part, on remarque sur les figures 3.4(a) et (c) et 3.5(a) et (c) que le taux de diffusion est anisotrope à faible dopage alors qu'il devient isotrope (par rapport à $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$) à haut dopage. Cela nous indique que le terme linéaire en T de la résistivité provient du taux de diffusion anisotrope, c'est-à-dire de la diffusion sur les fluctuations d'onde de densité de spin. Notons toutefois qu'il y a toujours une certaine contribution en T^2 à la résistivité. Comme la résistivité est calculée en sommant les conductivités des différentes régions de la surface de Fermi et en inversant le résultat, ce qui correspond à

additionner des résistances en parallèle, la forme $AT + BT^2$ de la résistivité signifie que la région la plus conductrice a ce comportement. Il n'est donc pas clair s'il est possible d'attribuer les contributions en T et en T^2 à des mécanismes distincts. Il semble plutôt que la diffusion due aux fluctuations antiferromagnétiques produise à la fois ces deux contributions.

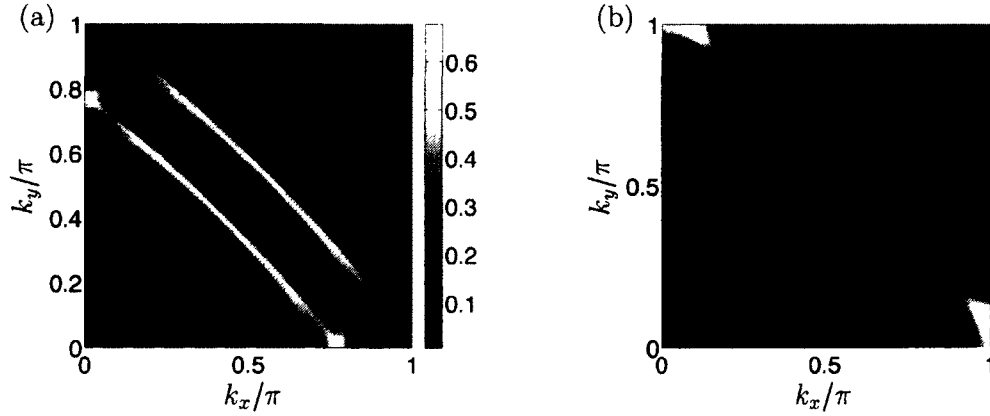


FIGURE 3.6 – (a) $-\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega=0)$ et (b) $A(\mathbf{k}, \omega=0)$ dans le quart de la zone de Brillouin au dopage $p=0.17$ (à gauche du point critique) et à la température $T=0.04t$ (160K), plus petite que la température de pseudogap.

Enfin, la figure 3.6 montre le taux de diffusion et la fonction spectrale à gauche du point critique et sous la température de pseudogap. On constate que la densité spectrale est fortement réduite sur une très grande partie de la surface de Fermi et que les parties restantes sont très incohérentes, ce qui explique que la résistivité sans correction de vertex soit élevée dans ce régime. On constate aussi que le taux de diffusion forme des lignes étroites, ce qui reflète le fait que la susceptibilité de spin soit composée de pics très étroits en vecteur d'onde et en fréquence. La distribution particulière du taux de diffusion en fonction du vecteur d'onde est due au fait que les fluctuations sont incommensurables. Les vecteurs d'onde près des maxima de la susceptibilité de spin, situés à $(\pi \pm \delta, \pi)$ et $(\pi, \pi \pm \delta)$, sont ceux transférés aux quasi-particules lors de la diffusion sur les fluctuations de spin, de sorte que la distribution du taux de diffusion ressemble à la superposition de quatre surfaces de Fermi déplacées par ces vecteurs.

3.2 Résistivité avec paramètres de saut au seconds et troisièmes plus proches voisins

On a vu dans l'article que, avec sauts au premiers voisins seulement, la résistivité sans correction de vertex augmente lorsque la température diminue sous la température de pseudogap, un comportement associé à un isolant, alors qu'elle diminue, comme dans un métal, lorsque les corrections de vertex sont ajoutées. Une question importante par rap-

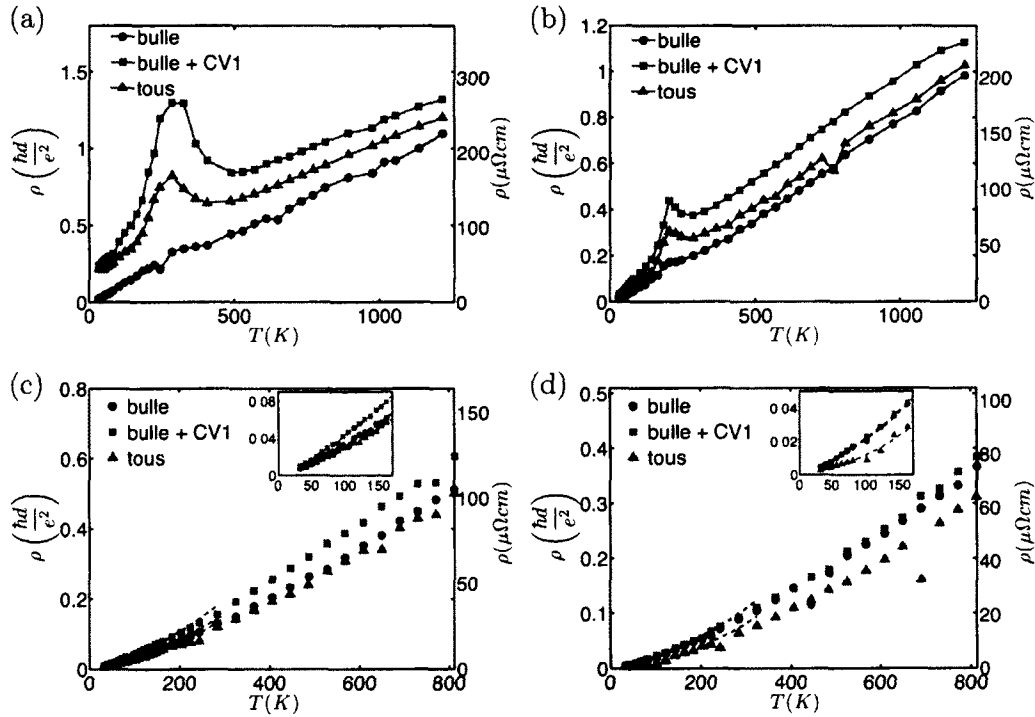


FIGURE 3.7 – Résistivité en fonction de la température aux densités (a) $n = 1.15$, (b) $n = 1.17$, (c) $n = 1.2$ (au point critique quantique) et (d) $n = 1.27$, pour les paramètres $U = 6t$, $t' = -0.175t$ et $t'' = 0.05$.

port à ce résultat est de savoir à quel point il est sensible aux variations de paramètres de bande. Si on ajoute des sauts aux seconds plus proches voisins, puisque la symétrie particule-trou du diagramme de phase est brisée, on doit considérer le dopage en électrons et le dopage en trous. La figure 3.7 montre les courbes de résistivité avec et sans corrections de vertex pour les paramètres de l'hamiltonien $U = 6t$, $t' = -0.175t$ et $t'' = 0.05$ à

quatre dopages en électrons autour du point critique, qui se trouve environ à une densité $n = 1.2$. On remarque d'abord en (a) et en (b) que, pour un dopage plus faible que le dopage critique, la résistivité avec corrections de vertex est toujours plus grande que celle calculée avec la "bulle" seulement et cette dernière diminue toujours lorsque T diminue, un comportement différent de celui observé pour $t' = t'' = 0$. Par contre, on remarque que, sous la température de pseudogap, la résistivité avec corrections de vertex cesse d'augmenter et se remet à diminuer. Ce phénomène est dû à une transition du régime de fluctuations commensurables, avec susceptibilité de spin maximale à $\mathbf{q}^{max} = (\pi, \pi)$, à un régime de fluctuations incommensurables, avec des maxima à $(\pi, \pi \pm \delta)$ et $(\pi \pm \delta, \pi)$. Comme on peut le voir sur la figure 3.8, à la densité $n = 1.15$, la longueur de corrélation cesse d'augmenter, se met à diminuer sur une certaine plage de température jusqu'à redevenir plus petite que la longueur d'onde de De Broglie thermique, pour ensuite recommencer à augmenter lorsque le maximum de la susceptibilité n'est plus à $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$. D'après la figure 3.7(a), la résistivité avec corrections de vertex se met à diminuer à une température un peu plus élevée que la température à laquelle la longueur de corrélation de spin atteint un maximum. On remarque toutefois qu'elle chute rapidement lorsque la longueur de corrélation se met à diminuer et qu'elle ne tend pas vers zéro à plus basse température, ce qui est dû au fait que la longueur de corrélation augmente à nouveau dans le régime incommensurable. Dans le supraconducteur dopé en électrons $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$, un comportement isolant est observé jusqu'aux plus basses températures dans le régime pseudogap []. Notons toutefois que les paramètres de bande pour les résultats de la figure 3.7 ne correspondent pas exactement à ce matériau, dont le dopage auquel $T^* = 0$ est $n_c \approx 1.16$ alors que $n_c \approx 1.2$ pour les paramètres de la figure 3.7. La retombée de la résistivité est ici une particularité des paramètres utilisés.

Le comportement dans le régime pseudogap change aussi lorsque le système est dopé en trous plutôt qu'en électrons. La figure 3.9(a) montre les courbes de résistivité pour la densité $n = 0.9$. Dans ce cas, la résistivité sans corrections de vertex diminue dans le régime pseudogap, alors qu'elle augmente très rapidement avec les corrections. Ce résultat est qualitativement l'inverse de ce qui est observé sur les figures 4(a) et (b) de l'article. De plus, d'après la figure 3.9(b), la température à laquelle la longueur de corrélation de spin ξ_{sp} dépasse la longueur d'onde de De Broglie thermique ξ_{th} est $T^* \approx 50K$ ($0.012t$), ce qui est beaucoup plus faible que la température de chute de la résistivité de la bulle, qui est environ de $400K$ ($0.1t$). Dans les cas dopés en électrons et avec $t' = 0$, les changements dans la résistivité de la bulle se produisent toujours lorsque ξ_{sp} est comparable à ξ_{th} .

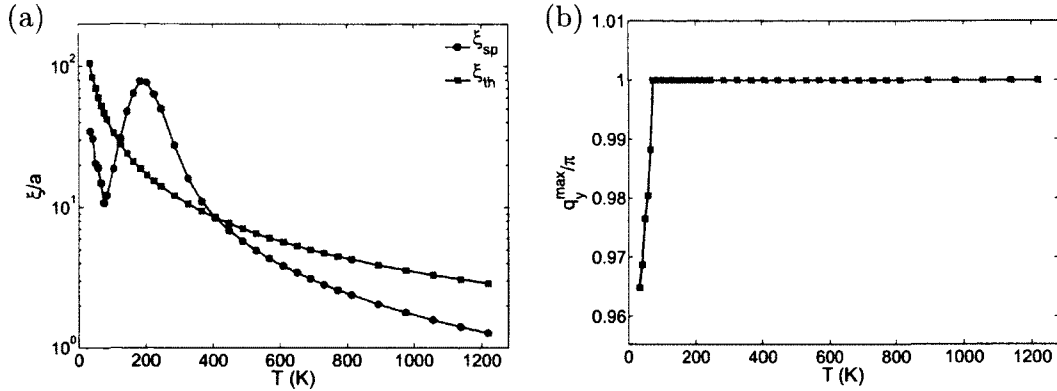


FIGURE 3.8 – (a) Longueur de corrélation de spin comparée à la longueur d’onde de De Broglie thermique et (b) composante selon y de la position d’un maximum de la susceptibilité $\mathbf{q}^{max} = (\pi, q_y^{max})$, à la densité $n = 1.15$ pour $U = 6t$, $t' = -0.175t$ et $t'' = 0.05$.

Une différence importante entre le cas montré à la figure 3.9 et le cas $t' = 0$ est que, comme on le constate sur la figure 3.10, les parties de la surface de Fermi affectées par les fluctuations sont près de $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ (et des autres points équivalents par symétrie) alors qu’elles sont plutôt près de $\mathbf{q} = (\pi/2, \pi/2)$ pour $t' = 0$ (figure 3.6(b)). Le point $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ est particulier puisqu’un point col dans la relation de dispersion à ce vecteur d’onde produit une singularité de Van Hove dans la densité d’états. Le fait que le pseudogap apparaisse à une température à laquelle ξ_{sp} est encore petit par rapport à ξ_{th} (figure 3.9(b)), et que les parties détruites de la surface de Fermi soient près de $\mathbf{q} = (\pi, 0)$, nous indique que la proximité du niveau de Fermi à la singularité de Van Hove favorise l’apparition du pseudogap. La forte densité d’états près de la singularité fait donc en sorte que la diffusion des quasiparticules par les fluctuations antiferromagnétiques est beaucoup plus forte du côté dopé en trous que dopé en électrons et lorsque $t' = 0$.

Dans le cas avec sauts aux plus proches voisins seulement, présenté dans l’article, le comportement métallique dans le pseudogap est dû à la contribution du terme Aslamazov-Larkin qui est très forte car la densité d’états est très asymétrique près du niveau de Fermi. Tel que mentionné à la fin de la section II D, c’est cette asymétrie qui contrôle la force de cette contribution. Or, cette asymétrie vient, d’une part, du fait que le niveau de Fermi est près de la singularité de Van Hove et, d’autre part, du fait que la densité d’états demeure très grande près de la singularité malgré l’effet des interactions. Dans le cas avec t' et t'' , la baisse de la résistivité sans corrections de vertex dans le régime pseudogap est

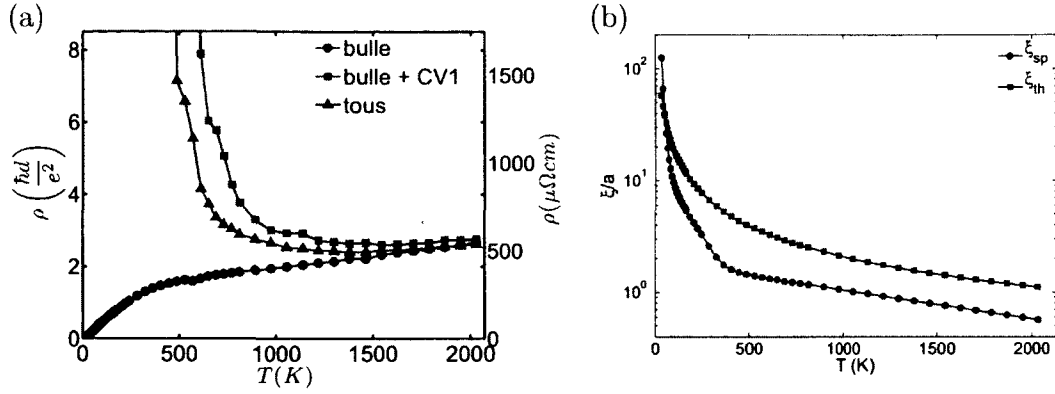


FIGURE 3.9 – (a) Résistivité en fonction de la température et (b) longueur de corrélation de spin comparée à la longueur d'onde de De Broglie thermique, à la densité $n = 0.9$ pour $U = 6t$, $t' = -0.175t$ et $t'' = 0.05$.

due au fait que la partie de la surface de Fermi qui n'est pas détruite par les fluctuations magnétiques devient de plus en plus cohérente sous T^* , comme on peut le voir sur la figure 3.10(d), contrairement au cas $t' = 0$ (figure 3.6(b)). Lorsque les corrections de vertex sont ajoutées, la réduction de la résistivité due à la seconde correction de vertex est beaucoup moins importante puisque la densité d'états est fortement réduite près de la singularité de Van Hove et, par conséquent, son asymétrie près de $\omega = 0$ est aussi fortement réduite. Au total, l'effet de la première correction de vertex, qui tend à rendre le système isolant, est alors seulement légèrement compensé par la seconde correction, ce qui ne fait que réduire la température à laquelle la résistivité se met à augmenter abruptement.

D'après les résultats pour $t' = 0$ et les deux types de dopage pour $t' \neq 0$, on constate que la dépendance en température de la résistivité dans le régime pseudogap dépend fortement des paramètres de bande et du type de dopage. Il s'agit d'un fait intéressant si l'on tente de comprendre la résistivité dans le régime pseudogap des SCHT. Tel que mentionné dans l'article, on observe aussi dans ces matériaux des différences de comportement en température de la résistivité dans ce régime. Dans certains cas, la résistivité diminue, alors qu'elle augmente dans d'autres [, ,]. Ainsi, pour comprendre ces différences on doit, d'une part, analyser le comportement observé en fonction du type de dopage et, pour un même type de dopage, voir s'il y a des différences importantes dans la structure de bandes. D'autre part, on observe que les corrections de vertex ont un effet très important dans ce régime et, tel que mentionné dans l'article, le désordre

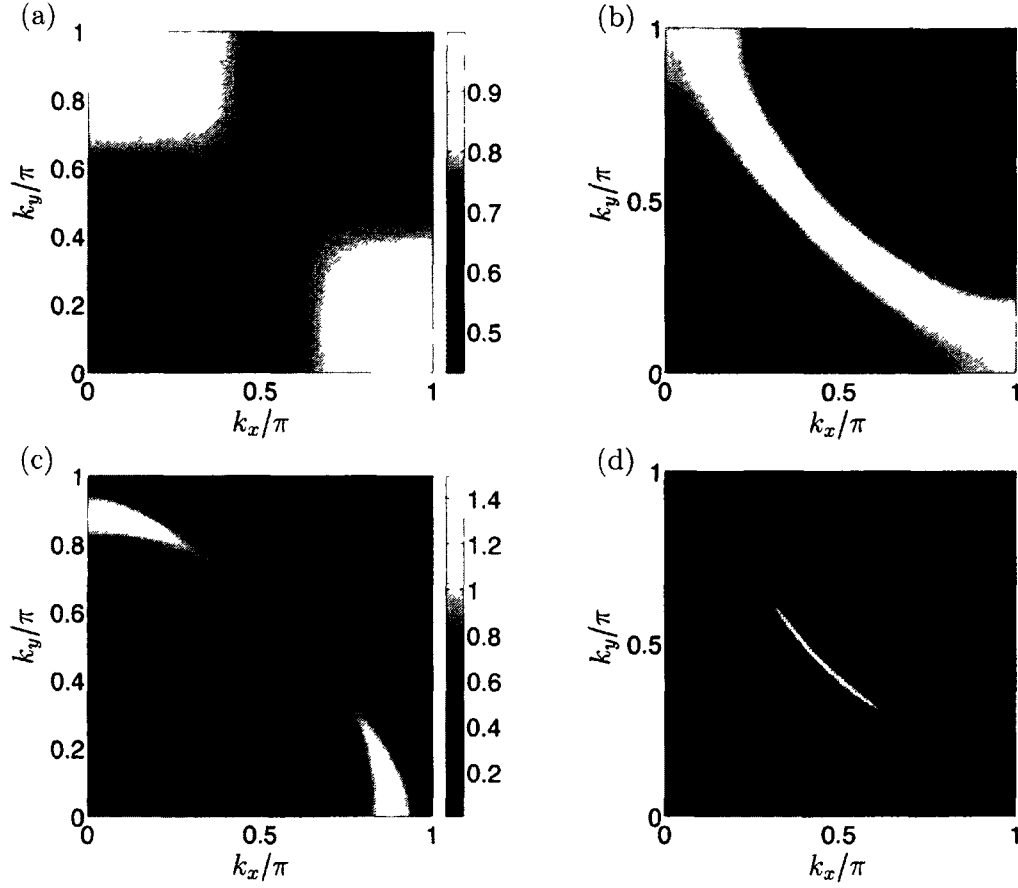


FIGURE 3.10 – (a) $-\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \omega = 0)$ et (b) $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ à la température $T = 0.3t$ (1200K) et (c) $-\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \omega = 0)$ et (d) $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ à $T = 0.025t$ (100K), à la densité $n = 0.9$ pour $U = 6t$, $t' = -0.175$ et $t'' = 0.05$

devrait avoir un effet important sur la contribution des corrections de vertex. Puisque les matériaux réels contiennent toujours un certain degré de désordre, variant d'un matériau à l'autre et même d'un échantillon à l'autre, il s'agit d'un autre facteur important à prendre en compte pour comprendre les différences de comportement de la résistivité dans le pseudogap.

Pour terminer, on trouve que la résistivité au point critique, figure 3.7(c), a une forme en $AT + BT^2$ à basse température. À plus haut dopage, figure 3.7(d), le terme linéaire persiste, mais est plus faible. En faisant un lissage de la forme $AT + BT^2$ pour quelques dopages en électrons à partir de la densité critique $n = 1.2$, on obtient les coefficients A et

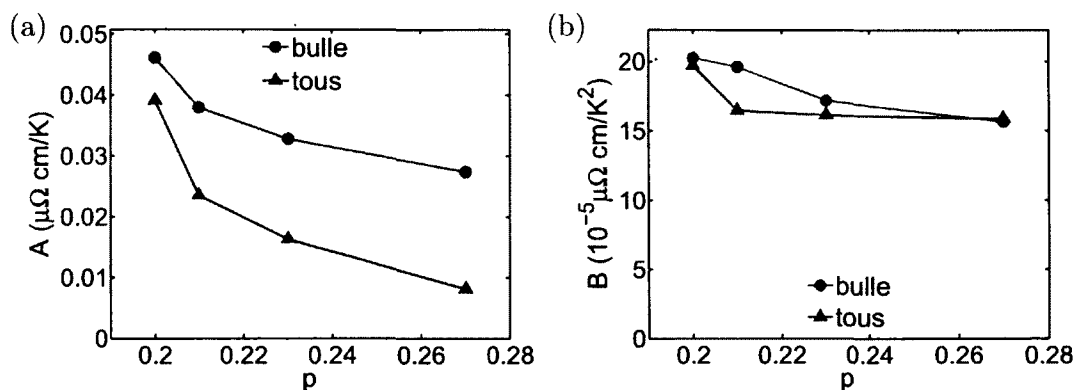


FIGURE 3.11 – Coefficients A et B en fonction du dopage en électrons pour les lissages $\rho(T) = AT + BT^2$ sur les courbes de résistivité pour $U = 6t$, $t' = -0.175t$ et $t'' = 0.05$, à partir du point critique.

B avec et sans corrections de vertex montrés à la figure 3.11. On note que le comportement à droite du point critique est très similaire à celui obtenu avec $t' = t'' = 0$, c'est-à-dire que le coefficient A chute rapidement à partir du point critique et diminue ensuite plus lentement, alors que le coefficient B varie peu sur la même plage de dopage. Par contre, la plage de température sur laquelle la résistivité est linéaire est beaucoup plus étroite que dans le cas $t' = t'' = 0$. La présence d'un terme linéaire faible du côté dopé en électrons est cohérente avec ce qui est observé avec le $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, où une résistivité linéaire est observée seulement à très basse température []. De plus, la présence d'un terme linéaire avec et sans t' semble indiquer que la résistivité dans cette partie du diagramme de phase a qualitativement le même comportement quels que soient les paramètres de bande. Cette observation est en accord avec ce qui est observé expérimentalement pour les supraconducteurs non-conventionnels, pour lesquels la présence du terme linéaire, dont la décroissance est corrélée avec la température critique dans le régime sur-dopé (ou avec l'augmentation de la pression), semble universelle [,]. D'autre part, d'après les figures (3.7)(a) et (b), la résistivité est très linéaire, avec et sans corrections de vertex, au-dessus de la température de pseudogap, du côté dopé en électrons avec ces paramètres de bande. Dans le cas $t' = 0$, la résistivité sans correction de vertex est approximativement linéaire au-dessus de T^* d'après les figures 4(a) et (b) de l'article, ce qui n'est, par contre, pas le cas avec corrections de vertex. Avec t' et t'' , d'après la figure (3.9)(a), la résistivité est clairement linéaire au-dessus du pseudogap sans corrections de vertex, alors qu'elle ne

l'est pas non plus avec les corrections, du moins à ce dopage.

Conclusion

L'objectif de la thèse était en premier lieu d'arriver à calculer la conductivité optique pour le modèle de Hubbard bi-dimensionnel à l'aide de l'approche auto-cohérente à deux particules (ACDP) et ce, en prenant en compte les corrections de vertex. L'inclusion de ces corrections était un aspect très important du projet puisque ces dernières sont nécessairement importantes lorsque des corrélations spatiales sont présentes, ce qui est le cas pour le modèle de Hubbard 2D sur un réseau carré, pour lequel les fluctuations antiferromagnétiques deviennent de plus en plus importantes lorsque le dopage s'approche du demi-remplissage et qu'il n'y a pas trop de frustration (t' n'est pas trop grand). Une approche numérique a été utilisée pour calculer ces corrections de vertex. Étant donné le caractère imposant des expressions à calculer et donc l'impossibilité d'utiliser directement la force brute de calcul d'un super ordinateur, un certain nombre d'astuces mathématiques et numériques ont dû être utilisées pour arriver à faire les calculs dans une durée raisonnable. Le principal outil mathématique qui a rendu les calculs possibles est la transformée de Fourier rapide (TFR).

Un autre outil abondamment utilisé dans les algorithmes est la spline cubique. Dans le calcul des fonctions en fréquences de Matsubara, où l'on doit d'abord passer en temps imaginaire, les splines cubiques ont été utilisées pour interpoler les fonctions entre les points discrets du temps imaginaire. Grâce à ses propriétés de régularité et à sa précision, la spline cubique permet, lors de la transformation de Fourier d'une fonction, d'obtenir explicitement son comportement à haute fréquence de Matsubara. Ce résultat s'est avéré extrêmement utile puisque, lorsque les développements asymptotiques des fonctions sont connus, une partie des sommes sur les fréquences peut se faire analytiquement, ce qui élimine les problèmes de convergence et réduit énormément le nombre de fréquences nécessaires pour obtenir une certaine précision.

Ainsi, des algorithmes utilisant systématiquement les TFR, les splines cubiques et les formes asymptotiques des fonctions ont été développés et traduits en langage informatique

afin de calculer numériquement la fonction de corrélation *courant-courant* avec corrections de vertex pour le modèle de Hubbard bi-dimensionnel. Le résultat est que le calcul de cette fonction en un point du diagramme de phase peut maintenant être fait dans une durée variant entre quelques dizaines de minutes à haute température et quelques jours à basse température, alors que ce calcul est impossible à faire par la méthode directe dans un temps acceptable à l'échelle humaine.

Une autre partie importante du travail technique accompli est la création d'un algorithme de prolongement analytique basé sur l'approche d'entropie maximale pour les fonctions connues en fréquences de Matsubara. Comme la méthode d'approximants de Padé n'est pas assez fiable et que les codes existants de prolongement analytique par entropie maximale sont conçus pour traiter des fonctions en temps imaginaires et sont peu précises, le développement d'un algorithme conçu pour nos besoins particuliers a été nécessaire. L'algorithme en question est précis puisqu'il utilise une spline cubique comme méthode d'interpolation sur l'axe des fréquences réelles. En plus d'améliorer la précision, qui est critique pour le prolongement analytique, cela permet une intégration analytique par morceaux de la forme spectrale, ce qui élimine en grande partie les difficultés du prolongement analytique à basse température dues aux problèmes d'intégration numérique. Cet algorithme a permis d'obtenir des résultats de résistivité stables en fonction de la température et du dopage, ce qui était nécessaire pour obtenir des lissages significatifs.

Un aspect intéressant des algorithmes développés dans le cadre du projet est qu'ils peuvent être utilisés avec d'autres méthodes de calcul appliquées aux systèmes corrélés. En effet, une bonne partie des algorithmes servant au calcul de la fonction de Green et de la fonction de corrélation *courant-courant* sont applicables au calcul numérique de diagrammes dont la forme apparaît dans tous les calculs similaires par des méthodes à faible couplage. D'autre part, l'algorithme de prolongement analytique peut être utilisé dans tous les cas où la fonction connue est en fréquence de Matsubara.

Les résultats numériques montrent que, dans les régions du diagramme de phase où les corrélations magnétiques sont importantes, les corrections de vertex changent qualitativement les résultats et sont donc cruciales. Un résultat important est que la première correction de vertex, de la forme Maki-Thompson, permet de satisfaire la règle de somme f à la précision numérique près. Aux dopages plus faibles que le point critique antiferromagnétique, les deux corrections de vertex produisent des changements majeurs dans la conductivité optique et la résistivité en fonction de la température. Ces changements dépendent qualitativement des paramètres de bande et du type de dopage lorsque la

symétrie particule-trou est brisée. Avec sauts au plus proches voisins seulement, dans le régime du pseudogap, le système paraît isolant sans correction de vertex, alors qu'on trouve un comportement métallique lorsque les corrections sont prises en compte. Au-delà du point critique quantique, les corrections de vertex changent quantitativement les résultats, diminuant la résistivité et la rendant plus quadratique.

Les calculs de conductivité pour le modèle de Hubbard ont pour objectif de comprendre les résultats de conductivité optique et de résistivité de matériaux fortement corrélés, en particulier les supraconducteurs à haute température critique (SHT). Les résultats présentés dans l'article, malgré le fait qu'ils soient obtenus pour un système avec sauts aux plus proches voisins seulement, ce qui ne correspond pas aux matériaux réels, montrent que les mêmes corrélations magnétiques responsables de la supraconductivité produisent aussi une résistivité linéaire à basse température, en accord avec ce qui est observé dans les supraconducteurs non-conventionnels. Dans les résultats de conductivité optique, la bosse observée dans l'infra-rouge moyen de certains SHT est aussi observée. Avec sauts aux seconds et troisièmes plus proches voisins, un terme linéaire est aussi observé à basse température, au-delà du point critique, dans les résultats analysés du côté dopé en électrons, ce qui semble indiquer que la présence du terme linéaire dans la résistivité près du point critique est robuste par rapports aux variations de paramètres de bande, quoique la grandeur du coefficient du terme linéaire puisse varier. Pour ce type de dopage, la résistivité à haute température à gauche du point critique est aussi très linéaire avec ou sans corrections de vertex, tandis que, du côté dopé en trous et avec sauts aux plus proches voisins seulement, seul la résistivité sans correction de vertex est linéaire au-dessus de la température de pseudogap T^* . Sous T^* , du côté dopé en électrons, la résistivité est toujours plus élevée avec les corrections de vertex, contrairement au cas $t' = 0$, et leur effet est aussi moins important que lorsque $t' = 0$. Lorsque les fluctuations magnétiques sont commensurables le comportement est isolant avec corrections de vertex. Par contre une retombée de la résistivité peut être observée pendant une transition vers un régime de fluctuations incommensurables. Du côté dopé en trous, dans le régime pseudogap, le comportement avec corrections de vertex est isolant alors qu'il est métallique sans corrections. L'effet des corrélations antiferromagnétiques sur la résistivité est beaucoup plus prononcé que du côté dopé en électrons et lorsque $t' = 0$ puisqu'il apparaît à une température beaucoup plus élevée que celle à laquelle la longueur de corrélation magnétique devient plus grande que la longueur d'onde de De Broglie thermique. Les résultats indiquent que ce renforcement du pseudogap est dû à la proximité du niveau de

Fermi à la singularité de Van Hove.

Pour la continuation du projet, d'abord, l'étude de la conductivité optique et de la résistivité en fonction de la température et du dopage avec les paramètres de bande utilisés dans la section 3.2 est à compléter. Il serait aussi intéressant de faire ces calculs avec d'autres paramètres de bande et valeurs de U , entre autre pour tenter de reproduire les résultats observés sur certains supraconducteurs à haute température critique. D'autre part, une étude du taux de diffusion au niveau de Fermi en fonction de la température en différents points de la surface de Fermi permettrait de comprendre mieux le comportement en température de la résistivité. Il serait aussi très utile de calculer de la conductivité en faisant des approximations analytiques basées sur les résultats numériques. Cela permettrait de comprendre mieux la physique contenue dans chaque terme de l'expression de la conductivité.

En faisant quelques modifications au code, on peut aussi calculer d'autres quantités reliées au transport et dont les expressions sont très similaires à la conductivité. Par exemple, en remplaçant le courant de charge par le courant de chaleur, on obtient la conductivité thermique. Aussi, en calculant la fonction de corrélation entre le courant de chaleur et le courant de charge, on peut calculer le pouvoir thermoélectrique, qui est le rapport entre cette fonction et la fonction de corrélation *courant-courant*.

Inclure l'effet du désordre dans le calcul de la conductivité serait très intéressant d'un point de vu théorique et permettrait de rendre le calcul plus réaliste. Toutefois, l'effet du désordre est de rendre fini le temps de vie des quasiparticules avant même d'ajouter les interactions. Cela ajoute une difficulté majeure au calcul des corrections de vertex puisque les algorithmes qui ont été développés pour les calculer tirent profit du fait que certains propagateurs n'ont pas de self-énergie afin de simplifier la partie numérique du calcul et la rendre possible dans un temps acceptable. Une approche de calcul numérique complètement différente devrait donc être utilisée afin de pouvoir traiter à la fois le désordre et les corrections de vertex.

Annexe A

Règle de somme f pour la conductivité

L'équation de continuité s'écrit

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{A.1})$$

ou encore

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{q}, \omega) + \nabla \cdot \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) &= 0 \\ \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (-i\omega) e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{q}, \omega) + \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} (i\mathbf{q}) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

et en faisant la transformée de Fourier.

$$-\omega \rho(\mathbf{q}, \omega) + \mathbf{q} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) = 0. \quad (\text{A.3})$$

Si $\mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) = j_x(\mathbf{q}, \omega) \hat{x}$, on a

$$q_x j_x(\mathbf{q}, \omega) = \omega \rho(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{A.4})$$

Maintenant, par définition. on a

$$\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\omega(t-t')} \langle [j_x(\mathbf{r}, t), j_x(\mathbf{r}', t')] \rangle \quad (\text{A.5})$$

où on a supposé l'invariance sous translation dans l'espace et tenu compte du fait que cette fonction dépend de $t - t'$ puisque la moyenne est prise à l'équilibre. Maintenant, supposons $-\frac{\Delta t}{2} < t < \frac{\Delta t}{2}$ avec $\Delta t \rightarrow \infty$. On peut écrire

$$\begin{aligned}\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega) &= \sum_{\mathbf{r}} \int_{-\frac{\Delta t}{2}}^{\frac{\Delta t}{2}} dt e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{i\omega(t-t')} \langle [j_x(\mathbf{r}, t), j_x(\mathbf{r}', t')] \rangle \\ &= \frac{1}{N\Delta t} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \int_{-\frac{\Delta t}{2}}^{\frac{\Delta t}{2}} \int_{-\frac{\Delta t}{2}}^{\frac{\Delta t}{2}} dt' dt e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} e^{i\omega t} e^{-i\omega t'} \langle [j_x(\mathbf{r}, t), j_x(\mathbf{r}', t')] \rangle \\ &= \frac{1}{N\Delta t} \langle [j_x(\mathbf{q}, \omega), j_x(-\mathbf{q}, -\omega)] \rangle.\end{aligned}\quad (\text{A.6})$$

En utilisant (A.4), on a

$$\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\omega^2}{q_x^2} \frac{1}{N\Delta t} \langle [\rho(\mathbf{q}, \omega), \rho(-\mathbf{q}, -\omega)] \rangle, \quad (\text{A.7})$$

c'est-à-dire,

$$\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\omega^2}{q_x^2} \chi''_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{A.8})$$

En utilisant cette expression, on peut écrire

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} = \frac{1}{q_x^2} \int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{A.9})$$

Or on a

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega \chi''_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) = \left(i \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} 2\chi''_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) \right) \Big|_{t=0} \quad (\text{A.10})$$

et, par définition,

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} 2\chi''_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \langle [\rho(\mathbf{q}, t), \rho(-\mathbf{q}, 0)] \rangle, \quad (\text{A.11})$$

on obtient alors

$$\begin{aligned}\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} &= \frac{1}{q_x^2} \frac{1}{N} \langle \left[i \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{q}, t), \rho(-\mathbf{q}, 0) \right] \rangle \Big|_{t=0} \\ &= \frac{1}{q_x^2} \frac{1}{N} \langle [[\rho(\mathbf{q}), H](t), \rho(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \Big|_{t=0}.\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

où H est ici l'hamiltonien de Hubbard. Quelques calculs de commutateurs plus tard, on obtient

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega} = \frac{1}{q_x^2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 2\epsilon_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{A.13})$$

Lorsque $\mathbf{q} \rightarrow 0$, on a

$$\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} q_x + \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} q_y + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} q_x^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} q_y^2 + \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} q_x q_y, \quad (\text{A.14})$$

et si l'on considère la conductivité longitudinale avec $\mathbf{q} = q_x \hat{x}$, on obtient

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(q_x, \omega)}{\omega} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} n_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{A.15})$$

c'est-à-dire,

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(q_x, \omega)}{\omega} = -\langle k_x \rangle_0, \quad (\text{A.16})$$

d'après (1.72).

Réécrivons la définition de la conductivité,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{\langle k_x \rangle_0 + \chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)}{i(\omega + i\eta)} \\ &= \left(-iP \frac{1}{\omega} - \pi \delta(\omega) \right) [\langle k_x \rangle_0 + \chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)], \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

la partie réelle de cette fonction (qui nous donne le spectre d'absorption) s'écrit donc

$$\text{Re} \sigma_{xx}(\mathbf{q}, \omega) = -\pi \delta(\omega) [\langle k_x \rangle_0 + \chi'_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)] + P \frac{\chi''_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega}, \quad (\text{A.18})$$

avec $\chi_{J_x J_x} = \chi'_{J_x J_x} + i\chi''_{J_x J_x}$.

Si l'on se restreint à la conductivité longitudinale, on peut obtenir une expression plus simple. En utilisant le résultat (A.16) et la représentation spectrale de $\chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega)$:

$$\chi_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{J_x J_x}(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta}, \quad (\text{A.19})$$

la conductivité longitudinale se réécrit

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx}(q_x, \omega) &= \frac{1}{i(\omega + i\eta)} \left(- \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega'} + \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta} \right) \\
 &= \frac{1}{i(\omega + i\eta)} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{(\omega + i\eta) \chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega'(\omega' - \omega - i\eta)} \\
 &= \frac{1}{i} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega')}{\omega'(\omega' - \omega - i\eta)}
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

et on obtient alors

$$\text{Re } \sigma_{xx}(q_x, \omega) = \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega)}{\omega}. \tag{A.21}$$

Donc finalement, d'après (A.16), la règle de somme pour la conductivité longitudinale est

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Re } \sigma_{xx}(q_x, \omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega)}{\omega} = -\frac{\langle k_x \rangle_0}{2}, \tag{A.22}$$

pour $q_x \rightarrow 0$. Notons que d'après la représentation spectrale pour $\chi_{j_x j_x}(q_x, iq_n)$:

$$\chi_{j_x j_x}(q_x, iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''_{j_x j_x}(q_x, \omega)}{\omega - iq_n}, \tag{A.23}$$

on a

$$\chi_{j_x j_x}(q_x, iq_n = 0) = -\langle k_x \rangle_0. \tag{A.24}$$

Annexe B

Hamiltonien en présence du champs électro-magnétique

L'Hamiltonien de Hubbard en présence d'un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ s'écrit

$$H(t) = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (\text{B.1})$$

où $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$. Cette forme assure l'invariance de forme de l'équation de Shrödinger ainsi que l'invariance des quantités physiques sous une transformation de jauge, ce que nous allons montrer dans ce qui suit. Si on effectue un changement de jauge :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t) \\ V(\mathbf{r}, t) &\rightarrow V(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

où $V(\mathbf{r}, t)$ est le potentiel scalaire, l'Hamiltonien (B.1) devient

$$\tilde{H}(t) = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot [\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t)]} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{i\sigma} \frac{\partial f(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} n_{i\sigma}. \quad (\text{B.3})$$

Maintenant, en supposant que

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H(t) |\Psi\rangle \quad (\text{B.4})$$

on doit avoir que

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'\rangle = \tilde{H}(t) |\Psi'\rangle \quad (\text{B.5})$$

où $|\Psi'\rangle$ est la fonction d'onde correspondant à la nouvelle jauge, et évidemment les quantités physiques $\langle\Psi'|\hat{O}'|\Psi'\rangle$ ne doivent pas dépendre de la jauge. Pour respecter ces conditions, la fonction d'onde $|\Psi'\rangle$ doit être donnée par

$$|\Psi'\rangle = e^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} |\Psi\rangle. \quad (\text{B.6})$$

Vérifions d'abord (B.5) :

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi'\rangle &= i\frac{\partial}{\partial t}e^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} |\Psi\rangle \\ &= -\sum_{i\sigma} \frac{\partial f(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} n_{i\sigma} e^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} |\Psi\rangle + ie^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle \\ &= -\sum_{i\sigma} \frac{\partial f(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} n_{i\sigma} |\Psi'\rangle + e^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} H(t) |\Psi\rangle \\ &= -\sum_{i\sigma} \frac{\partial f(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} n_{i\sigma} |\Psi'\rangle + e^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} H(t) e^{-i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} |\Psi'\rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

or on a

$$\begin{aligned} e^{i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} H(t) e^{-i\sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma}} \\ &= -\sum_{ij\sigma} t_{ij} e^{i\sum_{i\sigma'} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma'}} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i\sum_{i\sigma'} f(\mathbf{r}_i, t)n_{i\sigma'}} e^{-i\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ &= -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{i[f(\mathbf{r}_i, t) - f(\mathbf{r}_j, t)]} e^{-i\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ &= -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} [\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t)]} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

et donc

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi'\rangle &= -\sum_{i\sigma} \frac{\partial f(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} n_{i\sigma} |\Psi'\rangle \\ &\quad + \left(-\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} [\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t)]} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right) |\Psi'\rangle \\ i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi'\rangle &= \tilde{H}(t) |\Psi'\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Maintenant, la définition (B.6) et la transformation (B.8) de $H(t)$ sont équivalentes à la transformation

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^\dagger &\rightarrow e^{if(\mathbf{r}_i,t)} c_{i\sigma}^\dagger \\ c_{i\sigma} &\rightarrow e^{-if(\mathbf{r}_i,t)} c_{i\sigma} . \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

De façon générale, un opérateur hermitique s'écrit comme une combinaison linéaire d'opérateurs tels que

$$\hat{O} = c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger c_{i_{N+1}} \dots c_{i_{2N}} , \quad (\text{B.11})$$

où $i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$. En appliquant la transformation (B.10), cet opérateur devient

$$\hat{O}' = e^{i[\sum_{j=1}^N f(\mathbf{r}_{i_j}, t) - \sum_{j=N+1}^{2N} f(\mathbf{r}_{i_j}, t)]} c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger c_{i_{N+1}} \dots c_{i_{2N}} \quad (\text{B.12})$$

et on obtient

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | \hat{O}' | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | e^{-i \sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t) n_{i\sigma}} e^{i[\sum_{j=1}^N f(\mathbf{r}_{i_j}, t) - \sum_{j=N+1}^{2N} f(\mathbf{r}_{i_j}, t)]} \\ &\quad c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger c_{i_{N+1}} \dots c_{i_{2N}} e^{i \sum_{i\sigma} f(\mathbf{r}_i, t) n_{i\sigma}} | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Dans cette expression, les facteurs $e^{if(\mathbf{r}_i,t)n_{i\sigma}}$ commutent avec \hat{O} si $c_{i\sigma}$ et $c_{i\sigma}^\dagger$ ne sont pas dans \hat{O} , on obtient donc

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | \hat{O}' | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | e^{-i \sum_{j=1}^N f(\mathbf{r}_{i_j}, t)} e^{i[\sum_{j=1}^N f(\mathbf{r}_{i_j}, t) - \sum_{j=N+1}^{2N} f(\mathbf{r}_{i_j}, t)]} \\ &\quad c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger c_{i_{N+1}} \dots c_{i_{2N}} e^{i \sum_{j=N+1}^{2N} f(\mathbf{r}_{i_j}, t)} | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_N}^\dagger c_{i_{N+1}} \dots c_{i_{2N}} | \Psi \rangle \\ \langle \Psi' | \hat{O}' | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Donc, comme il se doit, les quantités physiques ne dépendent pas du choix de jauge. On a montré que l'Hamiltonien (B.1) préserve la forme de l'équation de Shrödinger, à conditions de transformer la fonction d'onde selon (B.6), et que cette transformation préserve les valeurs attendues de quantités physiques. L'Hamiltonien (B.1) satisfait donc l'invariance de jauge et peut être utilisé en toute généralité.

Annexe C

L'opérateur courant dans la base discrète

L'Hamiltonien de Hubbard en présence d'un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ s'écrit

$$H(t) = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (\text{C.1})$$

Lorsque $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ est petit on peut remplacer l'exponentielle par sa série de Taylor :

$$e^{-i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} \approx 1 - i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2} \left(\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \dots \quad (\text{C.2})$$

et (C.1) s'écrit

$$\begin{aligned} H(t) &= - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \left(1 - i \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2} \left(\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \right) \\ &\quad + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \\ &= - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \left(\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Maintenant, posons $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_x(\mathbf{r}, t)\hat{x}$ et faisons une approximation linéaire pour $A_x(\mathbf{r}, t)$ entre les sites voisins i et j . On obtient alors

$$\int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int_i^j dx A_x(\mathbf{r}, t) \approx \begin{cases} \frac{x_{ij}}{2} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_j, t)] & |x_{ij}| = 1 \\ \frac{x_{ij}}{4} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x(\frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{2}, t) + A_x(\mathbf{r}_j, t)] & |x_{ij}| = 2 \\ \frac{x_{ij}}{6} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x(\frac{2\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{3}, t) + 2A_x(\frac{\mathbf{r}_i + 2\mathbf{r}_j}{3}, t) + A_x(\mathbf{r}_j, t)] & |x_{ij}| = 3 \\ \vdots & \vdots \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

Bien sûr on pourrait utiliser une meilleure approximation de l'intégrale que celle des trapèzes, comme Simpson 1/3 par exemple, mais on s'intéresse au cas où $A_x(\mathbf{r}, t)$ varie peu sur une distance comparable au pas du réseau (la longueur d'onde de l'onde électromagnétique est beaucoup plus grande que le pas du réseau) et l'approximation des trapèzes est raisonnable dans ce cas. Avec (C.4), l'hamiltonien (C.3), avec des termes de saut jusqu'aux troisièmes plus proches voisins, devient

$$\begin{aligned} H(t) = & - \sum_{i\delta\sigma} t_\delta c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\sigma} + \frac{i}{2} \sum_{i\delta'\sigma} \delta_x t_{\delta'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta',\sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta', t)] \\ & + \frac{i}{4} \sum_{i\delta''\sigma} \delta_x^2 t_{\delta''} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta'',\sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_i + \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta'', t) \right] \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta, t)]^2 \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i\delta'\sigma} \delta_x^2 t_{\delta'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta',\sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta', t)]^2 \\ & + \frac{1}{32} \sum_{i\delta''\sigma} \delta_x^2 t_{\delta''} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta'',\sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_i + \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta'', t) \right]^2 \\ & + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

où δ , δ' et δ'' sont les vecteurs entre un site et ses premiers, seconds et troisièmes plus proches voisins, respectivement.

D'après l'annexe D, le courant dans la direction μ est donné par

$$j_\mu(\mathbf{r}, t) = -\frac{\delta H}{\delta A_\mu(\mathbf{r}, t)}. \quad (\text{C.6})$$

Toutefois, dans ce cas-ci, H est défini dans une base discrète et dans ce cas,

$$j_\mu(\mathbf{r}_j, t) = -\frac{\partial H}{\partial A_\mu(\mathbf{r}_j, t)}. \quad (\text{C.7})$$

En appliquant cette définition sur l'Hamiltonien (C.5), l'opérateur courant dans la direction x est

$$\begin{aligned} j_x^A(\mathbf{r}_l, t) = & -\frac{\partial}{\partial A_x(\mathbf{r}_l, t)} \left(\frac{i}{2} \sum_{i\delta\sigma} \delta_x t_\delta c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta, \sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta, t)] \right. \\ & + \frac{i}{2} \sum_{i\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta', \sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta', t)] \\ & + \frac{i}{4} \sum_{i\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta'', \sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_i + \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta'', t) \right] \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta, \sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta, t)]^2 \\ & + \frac{1}{8} \sum_{i\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta', \sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta', t)]^2 \\ & \left. + \frac{1}{32} \sum_{i\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta'', \sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_i + \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta'', t) \right]^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned} j_x^A(\mathbf{r}_l, t) = & -\frac{i}{2} \sum_{i\delta\sigma} \delta_x t_\delta c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta, \sigma} (\delta_{il} + \delta_{i+\delta, l}) - \frac{i}{2} \sum_{i\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta', \sigma} (\delta_{il} + \delta_{i+\delta', l}) \\ & - \frac{i}{4} \sum_{i\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta'', \sigma} (\delta_{il} + 2\delta_{i+\frac{\delta''}{2}, l} + \delta_{i+\delta'', l}) \\ & - \frac{1}{4} \sum_{i\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta, \sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta, t)] (\delta_{il} + \delta_{i+\delta, l}) \\ & - \frac{1}{4} \sum_{i\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta', \sigma} [A_x(\mathbf{r}_i, t) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta', t)] (\delta_{il} + \delta_{i+\delta', l}) \\ & - \frac{1}{16} \sum_{i\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta'', \sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_i, t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_i + \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_i + \delta'', t) \right] \\ & \times (\delta_{il} + 2\delta_{i+\frac{\delta''}{2}, l} + \delta_{i+\delta'', l}) \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$\begin{aligned}
j_x^A(\mathbf{r}_l, t) = & -\frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta,\sigma} + c_{l-\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) - \frac{i}{2} \sum_{\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta',\sigma} + c_{l-\delta',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\
& - \frac{i}{4} \sum_{\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'',\sigma} + 2c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l-\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\
& - \frac{1}{4} \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta,\sigma} [A_x(\mathbf{r}_l, t) + A_x(\mathbf{r}_l + \delta, t)] + c_{l-\delta,\sigma}^\dagger c_{l\sigma} [A_x(\mathbf{r}_l - \delta, t) + A_x(\mathbf{r}_l, t)] \right) \\
& - \frac{1}{4} \sum_{\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta',\sigma} [A_x(\mathbf{r}_l, t) + A_x(\mathbf{r}_l + \delta', t)] + c_{l-\delta',\sigma}^\dagger c_{l\sigma} [A_x(\mathbf{r}_l - \delta', t) + A_x(\mathbf{r}_l, t)] \right) \\
& - \frac{1}{16} \sum_{\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'',\sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_l, t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_l + \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_l + \delta'', t) \right] \right. \\
& \quad + 2c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_l - \frac{\delta''}{2}, t) + 2A_x(l, t) + A_x(\mathbf{r}_l + \frac{\delta''}{2}, t) \right] \\
& \quad \left. + c_{l-\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \left[A_x(\mathbf{r}_l - \delta'', t) + 2A_x\left(\mathbf{r}_l - \frac{\delta''}{2}, t\right) + A_x(\mathbf{r}_l, t) \right] \right).
\end{aligned} \tag{C.10}$$

Dans le cas où A_x varie peu sur une distance comparable au pas du réseau, cette expression devient

$$\begin{aligned}
j_x^A(\mathbf{r}_l, t) = & -\frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta,\sigma} + c_{l-\delta,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) - \frac{i}{2} \sum_{\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta',\sigma} + c_{l-\delta',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\
& - \frac{i}{4} \sum_{\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'',\sigma} + 2c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l-\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right) \\
& - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta,\sigma} + c_{l-\delta,\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) \\
& - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta',\sigma} + c_{l-\delta',\sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) \\
& - \frac{1}{4} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'',\sigma} + 2c_{l-\frac{\delta''}{2},\sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2},\sigma} + c_{l-\delta'',\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} \right).
\end{aligned} \tag{C.11}$$

et puisque l'on somme sur tous les vecteurs $\pm\delta^{(\prime)''}$, on peut changer le signe de ces

derniers dans les trois premières sommes pour obtenir

$$\begin{aligned}
j_x^A(\mathbf{r}_l, t) = & \frac{i}{2} \sum_{\delta\sigma} \delta_x t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta, \sigma} + c_{l+\delta, \sigma}^\dagger c_{l, \sigma} \right) + \frac{i}{2} \sum_{\delta'\sigma} \delta'_x t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta', \sigma} + c_{l+\delta', \sigma}^\dagger c_{l, \sigma} \right) \\
& + \frac{i}{4} \sum_{\delta''\sigma} \delta''_x t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l-\delta'', \sigma} + 2c_{l+\frac{\delta''}{2}, \sigma}^\dagger c_{l-\frac{\delta''}{2}, \sigma} + c_{l+\delta'', \sigma}^\dagger c_{l, \sigma} \right) \\
& - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta\sigma} \delta_x^2 t_\delta \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta, \sigma} + c_{l-\delta, \sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) \\
& - \frac{1}{2} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta'\sigma} \delta_x'^2 t_{\delta'} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta', \sigma} + c_{l-\delta', \sigma}^\dagger c_{l\sigma} \right) \\
& - \frac{1}{4} A_x(\mathbf{r}_l, t) \sum_{\delta''\sigma} \delta_x''^2 t_{\delta''} \left(c_{l\sigma}^\dagger c_{l+\delta'', \sigma} + 2c_{l-\frac{\delta''}{2}, \sigma}^\dagger c_{l+\frac{\delta''}{2}, \sigma} + c_{l-\delta'', \sigma}^\dagger c_{l, \sigma} \right).
\end{aligned} \tag{C.12}$$

Annexe D

Définition du courant en mécanique classique et semi-classique

Dans cette section, nous allons montrer que la relation entre le courant et l'hamiltonien en mécanique classique est

$$j(\mathbf{r}) = -\frac{\delta H}{\delta A(\mathbf{r}, t)}. \quad (\text{D.1})$$

Montrons d'abord qu'en mécanique classique le langrangien d'une particule chargée dans un champs électro-magnétique est

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{v} - q\phi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{D.2})$$

Les équations de Langrange sont

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_\mu} - \frac{\partial L}{\partial x_\mu} = 0 \quad (\text{D.3})$$

où $\mu = x, y, z$. On obtient

$$\frac{d}{dt} (mv_\mu + qA_\mu) - q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_\mu} \cdot \mathbf{v} + q \frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} = 0 \quad (\text{D.4})$$

c'est-à-dire,

$$\begin{aligned}
 m\dot{v}_\mu &= -q \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \frac{\partial x_\nu}{\partial t} - q \frac{\partial A_\mu}{\partial t} + q \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x_\mu} \cdot \mathbf{v} - q \frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} \\
 &= q \left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial t} \right) + q v_\nu \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \right) \\
 &= q E_\mu + q (\delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} - \delta_{\mu\beta} \delta_{\nu\alpha}) v_\nu \frac{\partial}{\partial x_\alpha} A_\beta
 \end{aligned} \tag{D.5}$$

où $\dot{v}_\mu = -\partial v_\mu / \partial t$, E_μ est la composante μ du champs électrique, et les indices répétés sont sommés. Maintenant, on utilise l'identité suivante

$$\delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} - \delta_{\mu\beta} \delta_{\nu\alpha} = \epsilon_{\mu\nu\gamma} \epsilon_{\gamma\alpha\beta}, \tag{D.6}$$

où $\epsilon_{\mu\nu\gamma}$ est le symbole de Levi-Civita, pour obtenir

$$\begin{aligned}
 m\dot{v}_\mu &= q E_\mu + q \epsilon_{\mu\nu\gamma} v_\nu \left(\epsilon_{\gamma\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} A_\beta \right) \\
 &= q E_\mu + q \epsilon_{\mu\nu\gamma} v_\nu (\nabla \times \mathbf{A})_\gamma \\
 &= q E_\mu + q [\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A})]_\mu \\
 m\dot{v}_\mu &= q E_\mu + q (\mathbf{v} \times \mathbf{B})_\mu
 \end{aligned} \tag{D.7}$$

où on reconnaît à droite la force de Lorentz. On retrouve donc l'équation classique du mouvement de la particule dans le champs électro-magnétique. L'expression (D.2) est donc le bon langrangien. Maintenant, de (D.2), on a

$$\frac{\partial L}{\partial A_\mu(\mathbf{r}, t)} = q v_\mu = j_\mu. \tag{D.8}$$

D'autre part, l'hamiltonien est défini comme la transformée de Legendre du langrangien :

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_\mu p_\mu \cdot v_\mu - L(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \tag{D.9}$$

où

$$p_\mu = \frac{\partial L}{\partial v_\mu} = m v_\mu + q A_\mu, \tag{D.10}$$

ce qui donne, d'après (D.2),

$$\begin{aligned} H &= m\mathbf{v}^2 + q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} + q\phi \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + q\phi, \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

et, d'après (D.10),

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + q\phi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{D.12})$$

Maintenant on a

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial A_\mu} &= \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial A_\mu} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}]^2 \\ &= -\frac{q}{m} (p_\mu - qA_\mu) \\ &= -qv_\mu = -j_\mu \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

et donc

$$j_\mu(\mathbf{r}) = -\frac{\partial H(\mathbf{r}, t)}{\partial A_\mu(\mathbf{r}, t)}. \quad (\text{D.14})$$

Notons que l'on peut aussi montrer assez simplement en utilisant les propriétés générales des transformations de Legendre, que

$$\left(\frac{\partial H}{\partial A_\mu} \right)_{\mathbf{p}, \mathbf{r}} = -\left(\frac{\partial L}{\partial A_\mu} \right)_{\mathbf{v}, \mathbf{r}} \quad (\text{D.15})$$

ce qui donne

$$j_\mu = -\left(\frac{\partial H}{\partial A_\mu} \right)_{\mathbf{p}, \mathbf{r}}. \quad (\text{D.16})$$

Nous avons fait le cas d'une seule particule. Dans le cas de plusieurs particules identiques on a

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2m} \sum_i (\mathbf{p}_i - q\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t))^2 \\ &= \frac{1}{2m} \sum_i \mathbf{p}_i^2 - \frac{q}{m} \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) + \frac{q^2}{2m} \sum_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)^2 \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

où on a laissé tomber les termes d'énergie potentielle à une et deux particules de l'hamiltonien puisqu'il ne sont pas pertinent dans la dérivation du courant. On peut réécrire H'

comme

$$H' = \frac{1}{2m} \sum_i \mathbf{P}_i^2 - \int d^3r' \left(\frac{q}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \mathbf{P}_i \right) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) + \frac{q^2}{2m} \int d^3r' \left(\sum_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)^2, \quad (\text{D.18})$$

c'est-à-dire comme une fonctionnelle de $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. On a alors

$$\begin{aligned} -\frac{\delta H'}{\delta A_\mu(\mathbf{r}, t)} &= \frac{q}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) p_{\mu i} - \frac{q^2}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) A_\mu(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{q}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) [\mathbf{P}_i - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]_\mu \\ &= q \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) v_{\mu i}, \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

et donc

$$-\frac{\delta H'}{\delta A_\mu(\mathbf{r}, t)} = q \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) v_{\mu i} = j_\mu(\mathbf{r}) \quad (\text{D.20})$$

est clairement la densité de courant dans la direction μ . Dans le cas quantique, on doit remplacer p_i et r_i par leurs opérateurs correspondant P_i et R_i dans la première ligne de (D.17). Puisque ces opérateurs ne commutent pas on obtient

$$\begin{aligned} H' &= \frac{1}{2m} \sum_i \mathbf{P}_i^2 - \frac{q}{2m} \sum_i [\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t) + \mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t) \cdot \mathbf{P}_i] + \frac{q^2}{2m} \sum_i \mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t)^2 \\ &= \frac{1}{2m} \sum_i \mathbf{P}_i^2 - \int d^3r' \frac{q}{2m} \sum_i [\mathbf{P}_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) + \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) \mathbf{P}_i] \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \\ &\quad + \frac{q^2}{2m} \int d^3r' \sum_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) \mathbf{A}(\mathbf{r}', t)^2. \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

et

$$\begin{aligned} -\frac{\delta H'}{\delta A_\mu(\mathbf{r}, t)} &= \frac{q}{2m} \sum_i [\mathbf{P}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathbf{P}_i]_\mu - \frac{q^2}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) A_\mu(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{q}{2m} \sum_i \left([\mathbf{P}_i - q\mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t)] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) [\mathbf{P}_i - q\mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t)] \right)_\mu, \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

où

$$J_\mu(\mathbf{r}) = \frac{q}{2m} \sum_i \left([\mathbf{P}_i - q\mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t)] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) [\mathbf{P}_i - q\mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t)] \right)_\mu \quad (\text{D.23})$$

est la densité de courant dans le cas quantique. Cette forme symétrique par rapport à l'ordre des opérateurs $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$ et \mathbf{P}_i est nécessaire puisque \mathbf{R}_i et \mathbf{P}_i ne commutent pas, mais $J_\mu(\mathbf{r})$ doit être hermitique. Notons que l'on a pas quantifié le potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ et donc nous avons considéré un H' semi-classique.

Annexe E

Préfacteur de la conductivité

Comme on a utilisé des unités où $e = 1$, $\hbar = 1$, $a = 1$ et $t = 1$, on doit multiplier la conductivité par un préfacteur pour obtenir les bonnes unités. Pour définir le courant, on utilise

$$j_\mu(\mathbf{r}_i, t) = -\frac{\partial H}{\partial A_\mu(\mathbf{r}_i, t)} \quad (\text{E.1})$$

Si on écrit la partie de l'Hamiltonien qui contient le potentiel vecteur en écrivant explicitement ces constantes, on obtient

$$H_A(t) = -t \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} e^{-i \frac{ea}{\hbar} \int_i^j d\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} . \quad (\text{E.2})$$

Donc, dans le système d'unités que l'on a utilisé, au lieu de H et A on utilisait plutôt

$$H' = \frac{H}{t} \quad (\text{E.3})$$

et

$$A' = \frac{ea}{\hbar} A, \quad (\text{E.4})$$

ce qui donne

$$j_\mu(\mathbf{r}_i, t) = -\frac{\partial t H'}{\partial A'_\mu(\mathbf{r}_i, t)} \frac{\partial A'_\mu(\mathbf{r}_i, t)}{\partial A_\mu(\mathbf{r}_i, t)} = -t \frac{ea}{\hbar} \frac{\partial H'}{\partial A'_\mu(\mathbf{r}_i, t)} . \quad (\text{E.5})$$

$$\Rightarrow j_\mu(\mathbf{r}_i, t) = t \frac{ea}{\hbar} j'_\mu(\mathbf{r}_i, t) \quad (\text{E.6})$$

D'autre part, le courant en réponse linéaire est donné par la somme de tous les termes proportionnels à $A_\mu(\mathbf{r}_i, t)$, c'est-à-dire que

$$j'_\mu(\mathbf{r}_i, t) = \kappa \Lambda'_\mu(\mathbf{r}_i, t) = \frac{ea}{\hbar} \kappa \Lambda_\mu(\mathbf{r}_i, t), \quad (\text{E.7})$$

où κ est la constante de proportionnalité, ou encore, en transformée de Fourier,

$$j'_\mu(\mathbf{q}, \omega) = \frac{ea}{\hbar} \kappa A_\mu(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{E.8})$$

Maintenant, on a

$$A_\mu(\mathbf{q}, \omega) = \frac{E_\mu(\mathbf{q}, \omega)}{i(\omega + i\eta)} = \frac{\hbar}{t} \frac{E_\mu(\mathbf{q}, \omega)}{i(\omega' + i\eta')} \quad (\text{E.9})$$

où on a tenu compte du fait que, dans notre système d'unités, ω est en unité d'énergie t . On obtient donc

$$j'_\mu(\mathbf{q}, \omega) = \frac{ea}{t} \frac{\kappa}{i(\omega' + i\eta')} E_\mu(\mathbf{q}, \omega) \quad (\text{E.10})$$

et, finalement,

$$j_\mu(\mathbf{q}, \omega) = t \frac{ea}{\hbar} \frac{ea}{t} \frac{\kappa}{i(\omega' + i\eta')} E_\mu(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2 a^2}{\hbar} \frac{\kappa}{i(\omega' + i\eta')} E_\mu(\mathbf{q}, \omega), \quad (\text{E.11})$$

$$\begin{aligned} j_\mu(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{e^2 a^2}{\hbar} \sigma'(\mathbf{q}, \omega) E_\mu(\mathbf{q}, \omega) \\ &= \bar{\sigma}(\mathbf{q}, \omega) E_\mu(\mathbf{q}, \omega), \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

$\sigma'(\mathbf{q}, \omega)$ étant la conductivité sans unités que l'on a calculée. La conductivité $\bar{\sigma}(\mathbf{q}, \omega)$ n'est pas encore celle que l'on veut, en effet, puisque E est en $J/(Cm)$ et $\frac{e^2 a^2}{\hbar}$, en $C^2 m^2/(Js)$, le courant $j_\mu(\mathbf{q}, \omega)$ est en Cm/s . Il s'agit en fait du courant passant par un seul site de notre système. En effet, dans le calcul, toutes les fonctions sont normalisées par le volume, lui-même donné en unités du volume d'une maille primitive du réseau, soit $a^2 d$. On doit donc diviser par ce volume pour obtenir une densité de courant. La conductivité, donnée en $\Omega^{-1} m^{-1}$, est donc

$$\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\hbar d} \sigma'(\mathbf{q}, \omega). \quad (\text{E.13})$$

Notons que, pour comparer les résultats théoriques avec ceux obtenus pour les cuprates, qui ont généralement plus d'un plan conducteur de CuO_2 par maille primitive, on devrait multiplier notre conductivité par le nombre de ces plans par maille primitive.

Annexe F

Susceptibilité généralisée

Dans le formalisme de Baym et Kadanoff [,], la fonction de Green est donnée par

$$G_{\sigma}(1, 2; [\phi]) = - \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} \right]} \quad (\text{F.1})$$

où $K = H - \mu N$, $1 = (\mathbf{r}_1, \tau_1)$ et une barre sur un indice indique une somme sur cet indice. Calculons la dérivée fonctionnelle $\delta G_{\sigma}(1, 2; [\phi]) / \delta \phi_{\sigma'}(3, 4)$:

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_{\sigma}(1, 2; [\phi])}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} &= \\ &- \left(\frac{\delta}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} \left(\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} \right] \right)^{-1} \right) \text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \right] \\ &- \frac{1}{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} \right]} \frac{\delta}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} \text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \right] \\ &= - \frac{(-)(-) \text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} c_{\sigma'}^{\dagger}(3) c_{\sigma'}(4) \right] \text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \right]}{\left(\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} \right] \right)^2} \\ &- \frac{-\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} c_{\sigma'}^{\dagger}(3) c_{\sigma'}(4) c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_{\tau} e^{-c_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\bar{1}) \phi_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}) c_{\bar{\sigma}}(\bar{2})} \right]} \quad (\text{F.2}) \end{aligned}$$

Ce qui s'écrit

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2; [\phi])}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_{\sigma'}(4, 3; [\phi]) G_\sigma(1, 2; [\phi]) - \langle T_\tau c_{\sigma'}^\dagger(3) c_{\sigma'}(4) c_\sigma^\dagger(2) c_\sigma(1) \rangle \quad (\text{F.3})$$

Annexe G

Équation de Bethe-Salpeter

Soit une fonction de Green $G_\sigma(1, 2)$ et sont inverse $G_\sigma^{-1}(1, 2)$ pour lesquelles on suppose la dépendance sur un champ source. Par définition

$$G_\sigma(1, \bar{1})G_\sigma^{-1}(\bar{1}, 2) = \delta(1 - 2) \quad (\text{G.1})$$

et on a

$$\frac{\delta G_\sigma(1, \bar{1})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} G_\sigma^{-1}(\bar{1}, 2) + G_\sigma(1, \bar{1}) \frac{\delta G_\sigma^{-1}(\bar{1}, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = 0, \quad (\text{G.2})$$

$$\Rightarrow \frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = -G_\sigma(1, \bar{1}) \frac{\delta G_\sigma^{-1}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (\text{G.3})$$

D'autre part, d'après l'équation de Dyson

$$G_\sigma^{-1}(1, 2) = G_\sigma^{(0)-1}(1, 2) - \phi_\sigma(1, 2) - \Sigma_\sigma(1, 2) \quad (\text{G.4})$$

où Σ_σ est la self-énergie, on a

$$\frac{\delta G_\sigma^{-1}(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = -\delta(1 - 3)\delta(2 - 4)\delta_{\sigma\sigma'} - \frac{\delta \Sigma_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}, \quad (\text{G.5})$$

ce qui donne, en remplaçant dans (G.3),

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_\sigma(1, 3)G_\sigma(4, 2)\delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{1}) \frac{\delta \Sigma_\sigma(\bar{1}, \bar{2})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (\text{G.6})$$

Maintenant, d'après la théorie des perturbation, Σ_σ est une fonctionnelle de G_σ et $G_{-\sigma}$, donc en utilisant la règle de dérivation en chaîne on obtient

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_\sigma(1, 3)G_\sigma(4, 2)\delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{1})\frac{\delta \Sigma_\sigma(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{\bar{\sigma}}(\bar{3}, \bar{4})}\frac{\delta G_{\bar{\sigma}}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (\text{G.7})$$

qui est une équation à la Bethe-Salpeter pour le canal particule-trou. On définit généralement

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{pt}(1, 2; 3, 4) = \frac{\delta \Sigma_\sigma(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} \quad (\text{G.8})$$

qui est le vertex irréductible dans le canal particule-trou. De sorte que (G.7) s'écrit

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_\sigma(1, 3)G_\sigma(4, 2)\delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{1})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}^{pt}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4})\frac{\delta G_{\bar{\sigma}}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)}G_\sigma(\bar{2}, 2). \quad (\text{G.9})$$

Annexe H

Résolution de l'équation de Bethe-Salpeter

L'équation (G.9) est de la forme

$$F(1, 2; 3, 4) = H(1, 2; 3, 4) + G_\sigma(1, \bar{1})G_\sigma(\bar{2}, 2)\Gamma(\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4})F(\bar{3}, \bar{4}; 3, 4), \quad (\text{H.1})$$

où il y a une somme sur chaque indice surmonté d'une barre. La forme la plus simple de Γ pour lequel cette équation est soluble est

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = C\delta(1-3)\delta(1-4)\delta(1-2) \quad (\text{H.2})$$

on obtient alors

$$F(1, 2; 3, 4) = H(1, 2; 3, 4) + CG_\sigma(1, \bar{1})G_\sigma(\bar{1}, 2)F(\bar{1}, \bar{1}; 3, 4). \quad (\text{H.3})$$

En définissant $\chi(1, 2; 3, 4) = -2G(1, 3)G(4, 2)$, et en prenant $2 = 1$ on a

$$F(1, 1; 3, 4) = H(1, 1; 3, 4) - \frac{C}{2}\chi(1, 1; \bar{1}, \bar{1})F(\bar{1}, \bar{1}; 3, 4). \quad (\text{H.4})$$

Le second terme est un produit de convolution, donc en prenant la transformée de Fourier par rapport à 1 on obtient

$$F(q; 3, 4) = H(q; 3, 4) - \frac{C}{2}\chi(q)F(q; 3, 4) \quad (\text{H.5})$$

d'où

$$F(q; 3, 4) = \frac{H(q; 3, 4)}{1 + \frac{C}{2}\chi(q)}. \quad (\text{H.6})$$

Finalement en prenant la transformée de Fourier inverse on obtient à nouveau une convolution

$$F(1, 1; 3, 4) = \frac{1}{1 + \frac{C}{2}\chi} (1, \bar{1}) H(\bar{1}, \bar{1}; 3, 4) \quad (\text{H.7})$$

où

$$\frac{1}{1 + \frac{C}{2}\chi} (1, 2) = \sum_q e^{iq \cdot (1-2)} \frac{1}{1 + \frac{C}{2}\chi(q)}. \quad (\text{H.8})$$

Pour obtenir la solution $F(1, 2; 3, 4)$ dans cette approximation il suffit d'insérer (H.7) dans l'expression (H.3).

De façon générale, si l'on connaît le vertex Γ dans un canal donné, soit un canal particule-trou (de charge ou de spin) ou un canal particule-particule, on peut résoudre l'équation (H.1) de la façon suivante :

Posons $J(1, 2; 3, 4) = G_\sigma(1, \bar{1})G_\sigma(\bar{2}, 2)\Gamma(\bar{1}, \bar{2}, 3, 4)$, on résout l'équation aux valeurs propres suivante :

$$J(\bar{1}, \bar{2}; 3, 4)\phi_\alpha(\bar{1}, \bar{2}) = \lambda_\alpha\phi_\alpha(3, 4) \quad (\text{H.9})$$

et, d'après (H.1), on obtient

$$\tilde{F}_\alpha(3, 4) = \phi_\alpha(\bar{1}, \bar{2})F(\bar{1}, \bar{2}; 3, 4) = \frac{\phi_\alpha(\bar{1}, \bar{2})H(\bar{1}, \bar{2}; 3, 4)}{1 - \lambda_\alpha} \quad (\text{H.10})$$

et enfin

$$F(1, 2; 3, 4) = \sum_\alpha \phi_\alpha^*(1, 2)\tilde{F}_\alpha(3, 4) \quad (\text{H.11})$$

en supposant que les fonctions propres ϕ_α sont normalisées. Le résultat (H.10) montre qu'une instabilité associée aux excitations décrites par $F(1, 2; 3, 4)$ apparaît lorsqu'une valeur propre λ_α s'approche de 1. Notons que (H.9) implique que l'on peut écrire $J(1, 2; 3, 4)$ sous la forme

$$J(1, 2; 3, 4) = G_\sigma(1, \bar{1})G_\sigma(\bar{2}, 2)\Gamma(\bar{1}, \bar{2}, 3, 4) = \sum_\alpha \lambda_\alpha\phi_\alpha^*(1, 2)\phi_\alpha(3, 4). \quad (\text{H.12})$$

S'il y a invariance sous translation il est alors plus pertinent de travailler dans

l'espace réciproque. Par exemple pour le canal particule-trou on a

$$\begin{aligned}\chi(k, k+q) &= \sum_{1,3} e^{ik \cdot (1-2)} e^{i(k+q) \cdot (2-3)} \chi(1, 3; 2^+, 2) \\ &= -2G(k)G(k+q) + \Gamma(k, -(k+q), -\bar{k}, \bar{k}+q)G(k)G(k+q)\chi(\bar{k}, \bar{k}+q)\end{aligned}\quad (\text{H.13})$$

on doit alors résoudre l'équation aux valeurs propres

$$\Gamma(\bar{k}, -(\bar{k}+q), -k, k+q)G(\bar{k})G(\bar{k}+q)\phi_{q\alpha}(\bar{k}) = \lambda_{q\alpha}\phi_{q\alpha}(k) \quad (\text{H.14})$$

On a alors

$$\tilde{\chi}_\alpha(q) = \phi_{q\alpha}(\bar{k})\chi(\bar{k}, \bar{k}+q) = \frac{-2\phi_{q\alpha}(\bar{k})G(\bar{k})G(\bar{k}+q)}{1 - \lambda_{q\alpha}} \quad (\text{H.15})$$

et

$$\chi(k, k+q) = \sum_{\alpha} \phi_{q\alpha}^*(k) \tilde{\chi}_\alpha(q) \quad (\text{H.16})$$

$$\chi(q) = \sum_k \chi(k, k+q) \quad (\text{H.17})$$

Dans ce cas-ci, on peut aussi écrire

$$\Gamma(k, -(k+q), -k', k'+q)G(k)G(k+q) = \sum_{\alpha} \lambda_{q\alpha} \phi_{q\alpha}^*(k) \phi_{q\alpha}(k') \quad (\text{H.18})$$

Il y a certaines formes de vertex pour lesquels on peut obtenir analytiquement les fonctions propres et les valeurs propres. La plus simple étant celle décrite au début de cet annexe, $\Gamma(1, 2, 3, 4) = C\delta(1-3)\delta(1-4)\delta(1-2)$, pour laquelle les valeurs propres sont $-(C/2)\chi(q)$, c'est-à-dire qu'il n'y a qu'une seule valeur propre (un seul α) pour chaque valeur de q . Les fonctions propres correspondantes sont

$$\phi_q(1, 2) = e^{-iq \cdot 1} \delta(2-1) \quad (\text{H.19})$$

ou encore $\phi_q(k) = I$, où I est l'identité.

En observant l'équation (H.13), on réalise qu'elle se résout facilement pour $\chi(q)$ si

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = \Gamma(1, 2, 3)\delta(4-3^+) \quad (\text{H.20})$$

En effet, $\Gamma(k, -(k+q), -\bar{k}, \bar{k}+q)$ ne dépend alors plus de \bar{k} et en intégrant l'équation sur

k , on obtient $\chi(q)$ à gauche et à droite, ce qui donne

$$\chi(q) = \frac{-2G(\bar{k})G(\bar{k}+q)}{1-\lambda_q} \quad (\text{H.21})$$

avec

$$\lambda_q = \Gamma(\bar{k}, -(\bar{k}+q), q)G(\bar{k})G(\bar{k}+q) \quad (\text{H.22})$$

Les fonctions propres correspondantes sont aussi $\phi_q(1, 2) = e^{-iq \cdot 1} \delta(2-1)$ et $\phi_q(k) = I$. Puisque

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = V_{\bar{\sigma}} \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(1, 2)}{\delta G_{\bar{\sigma}}(3, 4)}, \quad (\text{H.23})$$

où $V_{\bar{\sigma}}$ détermine s'il s'agit du spin ou de la charge, l'approximation (H.20) correspond à

$$\frac{\delta \Sigma_{\sigma}(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} = \frac{\delta \Sigma_{\sigma}(1, 2)}{\delta n_{\sigma'}(3)} \delta(4-3^+) \quad (\text{H.24})$$

c'est-à-dire qu'on suppose que Σ ne dépend que de la densité.

Supposons maintenant que l'on utilise l'approximation suivante

$$\Gamma(1, 2, 3, 4) = \Gamma_1(1, 2, 3)\Gamma_2(4-3), \quad (\text{H.25})$$

si l'on réécrit l'équation (H.9) au long,

$$\Gamma(\bar{1}, \bar{2}, 3, 4)G_{\sigma}(\bar{3}, \bar{1})G_{\sigma}(\bar{2}, \bar{4})\phi_{\alpha}(\bar{3}, \bar{4}) = \lambda_{\alpha}\phi_{\alpha}(3, 4) \quad (\text{H.26})$$

et qu'on remplace Γ par (H.25) on obtient

$$\Gamma_1(\bar{1}, \bar{2}, 3)\Gamma_2(4-3)G_{\sigma}(\bar{3}, \bar{1})G_{\sigma}(\bar{2}, \bar{4})\phi_{\alpha}(\bar{3}, \bar{4}) = \lambda_{\alpha}\phi_{\alpha}(3, 4). \quad (\text{H.27})$$

Il est clair que $\phi_{\alpha}(1, 2) = \Gamma_2(2-1)$ est une solution de cette équation, avec la valeur propre

$$\lambda = \Gamma_1(\bar{1}, \bar{2}, 3)G_{\sigma}(\bar{3}, \bar{1})G_{\sigma}(\bar{2}, \bar{4})\Gamma_2(\bar{4}-\bar{3}). \quad (\text{H.28})$$

Il s'agit de la valeur propre à $q = 0$ de la solution plus générale

$$\phi_q(1, 2) = e^{-iq \cdot 1} \Gamma_2(2-1) \quad (\text{H.29})$$

Pour obtenir les valeurs propres pour $q \neq 0$ il est préférable de passer à l'espace réci-

proque. En tenant compte de l'invariance sous translation, la transformée de Fourier de l'expression (H.25) est

$$\begin{aligned}\delta_{\Sigma k_i,0}\Gamma(k_1, k_2, k_3, k_4) &= \delta_{\Sigma_1^4 k_i,0}\Gamma_1(k_1, k_2, k_3 + k_4)\Gamma_2(k_4) \\ &= \delta_{\Sigma_1^4 k_i,0}\Gamma_1(k_1, k_2, -k_2 - k_1)\Gamma_2(-k_3 - k_2 - k_1)\end{aligned}\quad (\text{H.30})$$

et l'équation aux valeurs propres (H.14) s'écrit

$$\Gamma_1(\bar{k}, -(\bar{k} + q), q)\Gamma_2(k + q)G(\bar{k})G(\bar{k} + q)\phi_{q\alpha}(\bar{k}) = \lambda_{q\alpha}\phi_{q\alpha}(k) \quad (\text{H.31})$$

dont la fonction propre est

$$\phi_q(k) = \Gamma_2(k + q) \quad (\text{H.32})$$

avec la valeur propre,

$$\lambda_q = \Gamma_1(\bar{k}, -(\bar{k} + q), q)\Gamma_2(\bar{k} + q)G(\bar{k})G(\bar{k} + q). \quad (\text{H.33})$$

Encore ici, il n'y a qu'une seule fonction propre et valeur propre pour un q donné.

Annexe I

Transformée de Fourier rapide

Nous présentons ici le principe de la transformée de Fourier rapide (TFR) ainsi que les démonstrations qui mènent au nombre d'opérations à effectuer pour obtenir une partie seulement des d'éléments d'une transformée de Fourier discrète en utilisant un algorithme de TFR. Pour obtenir une description détaillée d'algorithmes de TFR, on peut consulter la référence (Nussbaumer).

Supposons une fonction F discrète dont les éléments sont f_j pour $j = 0, \dots, (N-1)$ où N est une puissance de 2. On veut connaître la transformée de Fourier de F , disons G , dont les éléments sont

$$g_m = \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{-i \frac{2\pi m j}{N}}, \quad m = 0, \dots, (N-1). \quad (\text{I.1})$$

Supposons que l'on sépare cette somme en deux, l'une sur les indices pairs et l'autre sur les indices impairs, on obtient

$$\begin{aligned} g_m &= \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} e^{-i \frac{2\pi m (2j)}{N}} + \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j+1} e^{-i \frac{2\pi m (2j+1)}{N}} \\ &= \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} e^{-i \frac{2\pi m (2j)}{N}} + e^{-i \frac{2\pi m}{N}} \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j+1} e^{-i \frac{2\pi m (2j)}{N}}, \quad m = 0, \dots, (N-1). \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

Les éléments pour $m < N/2$ peuvent s'écrire

$$g_n = \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} e^{-i \frac{2\pi n (2j)}{N}} + e^{-i \frac{2\pi n}{N}} \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j+1} e^{-i \frac{2\pi n (2j)}{N}}, \quad n = 0, \dots, (N/2-1) \quad (\text{I.3})$$

et, pour $m \geq N/2$, puisque $e^{-i2\pi(n+N/2)(2j)/N} = e^{-i2\pi n(2j)/N}$ et que $e^{-i2\pi(n+N/2)/N} = -e^{-i2\pi n/N}$, on obtient

$$g_{n+\frac{N}{2}} = \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j} e^{-i\frac{2\pi n(2j)}{N}} - e^{-i\frac{2\pi n}{N}} \sum_{j=0}^{N/2-1} f_{2j+1} e^{-i\frac{2\pi n(2j)}{N}}, \quad n = 0, \dots, (N/2 - 1) \quad (\text{I.4})$$

On remarque que G est donné par 2 transformées de Fourier de taille $N/2$ et N additions et $N/2$ multiplications par $e^{-i2\pi n/N}$. On peut refaire cette procédure pour chacune de ces deux transformées de Fourier, ce qui donnera 4 transformées de Fourier de taille $N/4$ et à nouveau N additions et $N/2$ multiplications. En continuant ainsi, on obtient un algorithme constitué de $\log_2 N$ étapes dont chacune consiste à effectuer N additions et $N/2$ multiplications, donc en tout, $N \log_2 N$ additions et $(N/2) \log_2 N$ multiplications. Il s'agit de l'algorithme de transformée de Fourier rapide de Cooley et Tukey []. En comparaison, utiliser (I.1) pour calculer chaque élément g_m de la transformée de Fourier nécessiterait N^2 additions et N^2 multiplications.

Annexe J

Transformée de Fourier d'une spline cubique

On veut approximer la transformée suivante

$$f(k) = \int_{x_0}^{x_N} dx g(x) e^{-ikx} \quad (\text{J.1})$$

en connaissant seulement un nombre $N+1$ de valeurs $g(x_i)$. Supposons que l'on approxime $g(x)$ par une spline cubique $S(x)$ définie comme

$$S(x) = \begin{cases} S_1(x) = a_1 x^3 + b_1 x^2 + c_1 x + d_1 & x_0 < x < x_1 \\ S_2(x) = a_2 x^3 + b_2 x^2 + c_2 x + d_2 & x_1 < x < x_2 \\ \vdots & \\ S_N(x) = a_N x^3 + b_N x^2 + c_N x + d_N & x_{N-1} < x < x_N . \end{cases} \quad (\text{J.2})$$

Avec les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} S_n(x_{n-1}) &= g(x_{n-1}) \\ S_n(x_n) &= g(x_n) \\ S'_n(x_{n-1}) &= S'_{n-1}(x_{n-1}) & n > 1 \\ S''_n(x_{n-1}) &= S''_{n-1}(x_{n-1}) & n > 1 \\ S'_1(x_0) &= g'(x_0) \\ S'_N(x_N) &= g'(x_N) , \end{aligned} \quad (\text{J.3})$$

qui forment les $4N$ équations nécessaires pour déterminer les $4N$ coefficients de la spline (J.2), l'intégrale (J.1) devient alors

$$f(k) \approx \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S_n(x) e^{-ikx}. \quad (\text{J.4})$$

Par intégration par partie, on obtient

$$\begin{aligned} f(k) &= \sum_{n=1}^N \left(-\frac{1}{ik} e^{-ikx} S_n(x) \Big|_{x_{n-1}}^{x_n} + \frac{1}{ik} \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \right) \\ &= \sum_{n=1}^N \left(-\frac{1}{ik} [e^{-ikx_n} S_n(x_n) - e^{-ikx_{n-1}} S_n(x_{n-1})] + \frac{1}{ik} \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \right) \\ &= -\frac{1}{ik} [e^{-ikx_1} S_1(x_1) - e^{-ikx_0} S_1(x_0) + e^{-ikx_2} S_2(x_2) - e^{-ikx_1} S_2(x_1) + \dots \\ &\quad + e^{-ikx_N} S_N(x_N) - e^{-ikx_{N-1}} S_N(x_{N-1})] \\ &\quad + \frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \\ &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} + \frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (\text{J.5})$$

où on a utilisé la continuité de $S(x)$ aux x_n pour éliminer les termes intermédiaires de la première somme de la première ligne. On peut maintenant utiliser à nouveau l'intégration par parties et puisque la somme de (J.5) a exactement la même forme que (J.4) avec $S'_n(x)$ à la place de $S_n(x)$ et en utilisant la continuité de $S'_n(x)$ aux x_n , on obtient

$$\begin{aligned} f(k) &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} + \frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S'_n(x) e^{-ikx} \\ &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} + \frac{1}{ik} \left[\frac{e^{-ikx_0} S'_1(x_0) - e^{-ikx_N} S'_N(x_N)}{ik} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{ik} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S''_n(x) e^{-ikx} \right] \\ &= \frac{e^{-ikx_0} S_1(x_0) - e^{-ikx_N} S_N(x_N)}{ik} + \frac{e^{-ikx_0} S'_1(x_0) - e^{-ikx_N} S'_N(x_N)}{(ik)^2} \\ &\quad + \frac{1}{(ik)^2} \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S''_n(x) e^{-ikx}. \end{aligned} \quad (\text{J.6})$$

Puisque l'on a aussi la continuité de $S_n''(x)$ aux x_n , en faisant l'intégration par partie une dernière fois on obtient

$$f(k) = \frac{e^{-ikx_0}S_1(x_0) - e^{-ikx_N}S_N(x_N)}{ik} + \frac{e^{-ikx_0}S_1'(x_0) - e^{-ikx_N}S_N'(x_N)}{(ik)^2} + \frac{e^{-ikx_0}S_1''(x_0) - e^{-ikx_N}S_N''(x_N)}{(ik)^3} + \frac{1}{(ik)^3} \sum_{n=1}^N S_n^{(3)} \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx e^{-ikx}, \quad (\text{J.7})$$

$$f(k) = \frac{e^{-ikx_0}S_1(x_0) - e^{-ikx_N}S_N(x_N)}{ik} + \frac{e^{-ikx_0}S_1'(x_0) - e^{-ikx_N}S_N'(x_N)}{(ik)^2} + \frac{e^{-ikx_0}S_1''(x_0) - e^{-ikx_N}S_N''(x_N)}{(ik)^3} + \frac{1}{(ik)^4} \sum_{n=1}^N S_n^{(3)} (e^{-ikx_{n-1}} - e^{-ikx_n}). \quad (\text{J.8})$$

Maintenant on a

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N S_n^{(3)} (e^{-ikx_{n-1}} - e^{-ikx_n}) &= \sum_{n=0}^{N-1} S_{n+1}^{(3)} (e^{-ikx_n} - e^{-ikx_{n+1}}) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} S_{n+1}^{(3)} (e^{-ikx_n} - e^{-ik(x_n + \Delta_x)}) \\ &= (1 - e^{-ik\Delta_x}) \sum_{n=0}^{N-1} S_{n+1}^{(3)} e^{-ikx_n} \end{aligned} \quad (\text{J.9})$$

et enfin,

$$f(k) = \frac{e^{-ikx_0}S_1(x_0) - e^{-ikx_N}S_N(x_N)}{ik} + \frac{e^{-ikx_0}S_1'(x_0) - e^{-ikx_N}S_N'(x_N)}{(ik)^2} + \frac{e^{-ikx_0}S_1''(x_0) - e^{-ikx_N}S_N''(x_N)}{(ik)^3} + \frac{1 - e^{-ik\Delta_x}}{(ik)^4} \sum_{n=0}^{N-1} S_{n+1}^{(3)} e^{-ikx_n}. \quad (\text{J.10})$$

Cette expression est valide lorsque k est différent de zéro. Le cas particulier $k = 0$ est

$$\begin{aligned}
 f(0) &= \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx S_n(x) \\
 &= \sum_{n=1}^N \int_{x_{n-1}}^{x_n} dx (a_n x^3 + b_n x^2 + c_n x + d_n) \\
 &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{a_n}{4} x^4 + \frac{b_n}{3} x^3 + \frac{c_n}{2} x^2 + d_n x \right) \Big|_{x_{n-1}}^{x_n} \\
 &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{a_n}{4} (x_n^4 - x_{n-1}^4) + \frac{b_n}{3} (x_n^3 - x_{n-1}^3) + \frac{c_n}{2} (x_n^2 - x_{n-1}^2) + d_n (x_n - x_{n-1}) \right).
 \end{aligned} \tag{J.11}$$

Le système d'équations (J.3) s'écrit

$$\begin{bmatrix}
 x_0^3 & x_0^2 & x_0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 3x_0^2 & 2x_0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 x_1^3 & x_1^2 & x_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -3x_1^2 & -2x_1 & -1 & 0 & 3x_1^2 & 2x_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -6x_1 & -2 & 0 & 0 & 6x_1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & x_1^3 & x_1^2 & x_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & x_2^3 & x_2^2 & x_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3x_{N-1}^2 & -2x_{N-1} & -1 & 0 & 3x_{N-1}^2 & 2x_{N-1} & 1 & 0 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -6x_{N-1} & -2 & 0 & 0 & 6x_{N-1} & 2 & 0 & 0 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_{N-1}^3 & x_{N-1}^2 & x_{N-1} & 1 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_N^3 & x_N^2 & x_N & 1 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3x_N^2 & 2x_N & 1 & 0
 \end{bmatrix}
 \times
 \begin{bmatrix}
 a_1 \\
 b_1 \\
 c_1 \\
 d_1 \\
 a_2 \\
 b_2 \\
 c_2 \\
 d_2 \\
 \vdots \\
 a_N \\
 b_N \\
 c_N \\
 d_N
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 g_0 \\
 g'_0 \\
 g_1 \\
 0 \\
 0 \\
 g_1 \\
 g_2 \\
 \vdots \\
 0 \\
 0 \\
 g_{N-1} \\
 g_N \\
 g'_N
 \end{bmatrix}
 \quad (\text{J.12})$$

Annexe K

Prolongement analytique par approximants de Padé

Un approximant de Padé pour N points est un quotient de polynômes :

$$P_N(z) = \frac{A_N(z)}{B_N(z)} \quad (\text{K.1})$$

où $A_N(z)$ et $B_N(z)$ sont des polynômes de degré $(N-1)/2$ et $(N-1)/2$, respectivement, si N est impair et $N/2-1$ et $N/2$ si N est pair. On peut aussi écrire $P_N(z)$ comme une fraction continue arrêtée de la forme

$$P_N(z) = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2(z-z_1)}{1 + \frac{a_3(z-z_2)}{1 + \frac{\dots}{1 + a_N(z-z_{N-1})}}}}. \quad (\text{K.2})$$

Si on utilise l'approximant pour faire un prolongement analytique d'une fonction en fréquences de Matsubara vers la fonction en fréquences réelles, on trouve les coefficients a_n de manière à satisfaire

$$P_N(i\omega_n) = f(i\omega_n), \quad n = 1 \dots N \quad (\text{K.3})$$

où $f(i\omega_n)$ est la fonction dont on veut obtenir le prolongement analytique. La forme (K.2) permet de trouver facilement les coefficients a_i qui satisfont (K.3). En effet, la fonction (K.2) évaluée en z_i ne dépend que des coefficients a_j pour $j \leq i$. Il suffit donc de commencer à $i = 1$ et on obtient ensuite chaque coefficient de manière récursive. La formule générale est

$$a_n = g_{n,n}, \quad g_{1,n} = f(i\omega_n), \quad n = 1 \dots N$$

$$g_{i,j} = \frac{g_{i-1,i-1} - g_{i-1,j}}{(i\omega_j - i\omega_{i-1})g_{i-1,j}}. \quad (\text{K.4})$$

Pour évaluer l'approximant à un z donné, le plus efficace est d'utiliser (K.1) où les polynômes A et B évalués en z sont donnés par les formules récursives suivantes :

$$A_{n+1}(z) = A_n(z) + a_{n+1}(z - z_n)A_{n-1}(z)$$

$$B_{n+1}(z) = B_n(z) + a_{n+1}(z - z_n)B_{n-1}(z) \quad (\text{K.5})$$

avec $A_0 = 0$, $A_1 = a_1$, $B_0 = B_1 = 1$. Cet algorithme peut être trouvé dans *Journal of Low Temperature Physics*, v29, p179, 1977.

D'autre part, on peut aussi écrire (K.1) en écrivant explicitement les polynômes $A_N(z)$ et $B_N(z)$ et considérer la série d'équations (K.3) comme un système d'équations linéaires à résoudre par un algorithme standard de l'algèbre linéaire.

Par exemple, si l'on veut obtenir le prolongement analytique d'une self-énergie connue pour un nombre pair de fréquence de Matsubara, on utilisera une fonction de la forme

$$\bar{\Sigma}_r(z) = \frac{p_0 + p_1 z + \dots + p_{r-1} z^{r-1}}{q_0 + q_1 z + \dots + q_{r-1} z^{r-1} + z^r}. \quad (\text{K.6})$$

Pour obtenir les coefficients, on doit résoudre le système d'équations

$$\bar{\Sigma}_r(ik_n) = \Sigma(ik_n), \quad n = 0, \dots, 2r - 1, \quad (\text{K.7})$$

où $k_n = (2n + 1)\pi T$. En utilisant la notation $\Sigma_n = \Sigma(ik_n)$, on obtient alors

$$\Sigma(ik_n) (q_0 + q_1(ik_n) + \dots + q_{r-1}(ik_n)^{r-1} + (ik_n)^r) = p_0 + p_1(ik_n) + \dots + p_{r-1}(ik_n)^{r-1}. \quad (\text{K.8})$$

$$p_0 + (ik_n)p_1 + \dots + (ik_n)^{r-1}p_{r-1} - \Sigma_n q_0 - \Sigma_n(ik_n)q_1 + \dots - \Sigma_n(ik_n)^{r-1}q_{r-1} = \Sigma_n(ik_n)^r. \quad (\text{K.9})$$

$$\begin{bmatrix} 1 & (ik_n) & \dots & (ik_n)^{r-1} & -\Sigma_n & -\Sigma_n(ik_n) & \dots & -\Sigma_n(ik_n)^{r-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{r-1} \\ q_0 \\ q_1 \\ \vdots \\ q_{r-1} \end{bmatrix} = \Sigma_n(ik_n)^r \quad (\text{K.10})$$

et le système complet s'écrit

$$\begin{bmatrix} 1 & (ik_0) & \dots & (ik_0)^{r-1} & -\Sigma_0 & -\Sigma_0(ik_0) & \dots & -\Sigma_0(ik_0)^{r-1} \\ 1 & (ik_1) & \dots & (ik_1)^{r-1} & -\Sigma_1 & -\Sigma_1(ik_1) & \dots & -\Sigma_1(ik_1)^{r-1} \\ \vdots & & & & & & & \vdots \\ 1 & (ik_{2r-1}) & \dots & (ik_{2r-1})^{r-1} & -\Sigma_{2r-1} & -\Sigma_{2r-1}(ik_{2r-1}) & \dots & -\Sigma_{2r-1}(ik_{2r-1})^{r-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_{r-1} \\ q_0 \\ q_1 \\ \vdots \\ q_{r-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_0(ik_0)^r \\ \Sigma_1(ik_1)^r \\ \vdots \\ \Sigma_{2r-1}(ik_{2r-1})^r \end{bmatrix} \quad (\text{K.11})$$

Si l'on connaît la self-énergie pour un nombre impair de coefficients on utilise

$$\bar{\Sigma}_r(z) = \frac{p_0 + p_1 z + \dots + p_{r-1} z^{r-1} + p_r z^r}{q_0 + q_1 z + \dots + q_{r-1} z^{r-1} + z^r} \quad (\text{K.12})$$

et le système s'écrit alors

$$\begin{bmatrix} 1 & (ik_0) & \dots & (ik_0)^r & -\Sigma_0 & -\Sigma_0(ik_0) & \dots & -\Sigma_0(ik_0)^{r-1} \\ 1 & (ik_1) & \dots & (ik_1)^r & -\Sigma_1 & -\Sigma_1(ik_1) & \dots & -\Sigma_1(ik_1)^{r-1} \\ \vdots & & & & & & & \vdots \\ 1 & (ik_{2r}) & \dots & (ik_{2r})^r & -\Sigma_{2r} & -\Sigma_{2r}(ik_{2r}) & \dots & -\Sigma_{2r}(ik_{2r})^{r-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_r \\ q_0 \\ q_1 \\ \vdots \\ q_{r-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_0(ik_0)^r \\ \Sigma_1(ik_1)^r \\ \vdots \\ \Sigma_{2r}(ik_{2r})^r \end{bmatrix} \quad (\text{K.13})$$

Notons que la matrice du système à résoudre est très mal conditionnée. En effet, le rapport du plus grand élément sur le plus petit est de l'ordre de $(ik_{2r})^r$, ce qui peut être très grand si on prend une fréquence de coupure élevée.

Pour plus d'information, voir *PRB*, *v61*, *p5147*, *2000*.

Annexe L

Fonction de réponse *courant-courant* dans la méthode auto-cohérente à deux particules

D'après l'annexe F, une valeur moyenne de l'équation (1.88) est donnée par

$$\langle T_\tau c_{\sigma_1}^\dagger(1)c_{\sigma_1}(1')c_{\sigma_2}^\dagger(2)c_{\sigma_2}(2') \rangle = -\frac{\delta G_{\sigma_2}(2',2)}{\delta \phi_{\sigma_1}(1,1')} + G_{\sigma_1}(1',1)G_{\sigma_2}(2',2) \quad (\text{L.1})$$

où $1 = (l_1, \tau_1)$. Toutefois la contribution du second terme de cette expression à (1.88) est nulle puisqu'elle donne simplement $\langle j_x(\mathbf{q}, \tau) \rangle_0 \langle j_x(-\mathbf{q}) \rangle_0$ et le courant paramagnétique est nul à l'équilibre. On obtient donc

$$\langle T_\tau j_x(\mathbf{q}, \tau_1) j_x(-\mathbf{q}, \tau_2) \rangle_0 = \sum_{l_1, l_2} e^{-i\mathbf{q} \cdot (l_1 - l_2)} \sum_{\delta_1 \delta_2 \sigma_1 \sigma_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \frac{\delta G_{\sigma_2}(2', 2)}{\delta \phi_{\sigma_1}(1, 1')} \quad (\text{L.2})$$

On peut tout de suite faire la somme sur σ_1 et σ_2 et utiliser l'invariance sous rotation du spin pour obtenir

$$\langle T_\tau j_x(\mathbf{q}, \tau_1) j_x(-\mathbf{q}, \tau_2) \rangle_0 = 2 \sum_{l_1, l_2} e^{-i\mathbf{q} \cdot (l_1 - l_2)} \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \left(\frac{\delta G_\uparrow(2', 2)}{\delta \phi_\uparrow(1, 1')} + \frac{\delta G_\downarrow(2', 2)}{\delta \phi_\downarrow(1, 1')} \right) \quad (\text{L.3})$$

et en définissant

$$\chi_+(1, 2|3, 4) = -2 \left(\frac{\delta G_\uparrow(1, 2)}{\delta \phi_\uparrow(3, 4)} + \frac{\delta G_\downarrow(1, 2)}{\delta \phi_\downarrow(3, 4)} \right) \quad (\text{L.4})$$

on obtient

$$\langle T_\tau j_x(1) j_x(2) \rangle_0 = - \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \chi_+(2', 2 | 1, 1'), \quad (\text{L.5})$$

$$\langle T_\tau j_x(\mathbf{q}, \tau_1) j_x(-\mathbf{q}, \tau_2) \rangle_0 = - \sum_{l_1, l_2} e^{-i\mathbf{q} \cdot (l_1 - l_2)} \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \chi_+(2', 2 | 1, 1'). \quad (\text{L.6})$$

Maintenant, à partir de l'équation à la Beth-Salpeter pour le canal *particule-trou* (G.7) :

$$\frac{\delta G_\sigma(1, 2)}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} = G_\sigma(1, 3) G_\sigma(4, 2) \delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{1}) \frac{\delta \Sigma_\sigma(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma(\bar{3}, \bar{4})} \frac{\delta G_\sigma(\bar{3}, \bar{4})}{\delta \phi_{\sigma'}(3, 4)} G_\sigma(\bar{2}, 2), \quad (\text{L.7})$$

où $\Sigma_\sigma(\bar{1}, \bar{2})$ est la self-énergie, et de l'invariance sous rotation du spin, la fonction de réponse (L.4) s'écrit

$$\chi_+(1, 2 | 3, 4) = -2G(1, 3)G(4, 2) + \Gamma_{ch}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4})G(1, \bar{1})G(\bar{2}, 2) \chi_+(\bar{3}, \bar{4} | 3, 4) \quad (\text{L.8})$$

où

$$\Gamma_{ch}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4}) = \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\downarrow(\bar{3}, \bar{4})} \quad (\text{L.9})$$

est le vertex irréductible de charge. La fonction $\chi_+(1, 2 | 3, 4)$ est égale à la susceptibilité de charge $\chi_{ch}(1, 4) = \langle T_\tau n_1(\tau_1) n_4(\tau_4) \rangle - n^2$ lorsque $2 \rightarrow 1^+$ et $3 \rightarrow 4^+$. Puisqu'on s'intéresse ici aux propriétés du système dans la phase paramagnétique, l'indice de spin n'est pas indiqué dans l'équation (L.8) puisque toutes les fonctions y sont indépendantes du spin.

Quant à la self-énergie, elle est donnée par

$$\begin{aligned} \Sigma_\sigma(1, 2) &= U G_{-\sigma}(1, 1^+) \delta(1 - 2) \\ &+ \frac{U}{4} [\Gamma_{sp}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5}) \chi_{sp}(\bar{4}, \bar{5}; 1) + \Gamma_{ch}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5}) \chi_{ch}(\bar{4}, \bar{5}; 1)] G_\sigma(1, \bar{2}) \end{aligned} \quad (\text{L.10})$$

où $\chi_{ch}(\bar{4}, \bar{5}; 1) = \chi_+(\bar{4}, \bar{5}; 1^+, 1)$ et

$$\chi_{sp}(1, 2 | 3, 4) = -2 \left(\frac{\delta G_\uparrow(1, 2)}{\delta \phi_\uparrow(3, 4)} - \frac{\delta G_\uparrow(1, 2)}{\delta \phi_\downarrow(3, 4)} \right) \quad (\text{L.11})$$

$$\Gamma_{sp}(\bar{1}, \bar{2}; \bar{3}, \bar{4}) = \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\downarrow(\bar{3}, \bar{4})} - \frac{\delta \Sigma_\uparrow(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\uparrow(\bar{3}, \bar{4})}$$

On doit maintenant faire une approximation afin de résoudre les équations (L.8)

et (L.10). L'approche auto-cohérente à deux particules, ou TPSC ("two-particle self-consistent"), consiste d'abord à poser

$$\Sigma_{\sigma}^{(1)}(1, \bar{1}) G_{\sigma}^{(1)}(\bar{1}, 2) = U g_{\uparrow\downarrow}(1) G_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+) G_{\sigma}^{(1)}(1, 2). \quad (\text{L.12})$$

où

$$g_{\uparrow\downarrow}(1) = \frac{\langle n_{\uparrow}(1) n_{\downarrow}(1) \rangle}{\langle n_{\uparrow}(1) \rangle \langle n_{\downarrow}(1) \rangle} \quad (\text{L.13})$$

L'expression (L.12) est exacte lorsque $2 \rightarrow 1^+$. En effet, à partir de l'équation du mouvement pour la fonction de Green et de l'équation de Dyson, on peut montrer que

$$\Sigma_{\sigma}(1, \bar{1}) G_{\sigma}(\bar{1}, 2) = -U \langle c_{-\sigma}^{\dagger}(1^+) c_{-\sigma}(1) c_{\sigma}(1^-) c_{\sigma}^{\dagger}(2) \rangle. \quad (\text{L.14})$$

et donc

$$\Sigma_{\sigma}(1, \bar{1}) G_{\sigma}(\bar{1}, 1^+) = U \langle n_{\uparrow}(1) n_{\downarrow}(1) \rangle. \quad (\text{L.15})$$

En multipliant l'équation (L.12) par $G_{\sigma}^{(1)-1}(2, 3)$ et en sommant sur 2, on obtient

$$\Sigma_{\sigma}^{(1)}(1, 3) = U g_{\uparrow\downarrow}(1) G_{-\sigma}(1, 1^+) \delta(1^- - 3) = U g_{\uparrow\downarrow}(1) n_{-\sigma}(1) \delta(1^- - 3) \quad (\text{L.16})$$

De cette dernière équation, et en utilisant le fait que

$$\frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)}{\delta G_{\sigma}(2, 3)} = \frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)}{\delta G_{-\sigma}(2, 3)} \quad (\text{L.17})$$

puisque le système est dans la phase paramagnétique, on obtient comme vertex de spin

$$\Gamma_{sp}(1, 2; 3, 4) = U_{sp} \delta(1 - 3) \delta(1^+ - 4) \delta(1^- - 2) \quad (\text{L.18})$$

où $U_{sp} = U g_{\uparrow\downarrow}(1)$. D'autre part, le vertex irréductible de charge est

$$\begin{aligned} \Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) &= \frac{\delta \Sigma_{\uparrow}(1, 2)}{\delta G_{\uparrow}(3, 4)} + \frac{\delta \Sigma_{\uparrow}(1, 2)}{\delta G_{\downarrow}(3, 4)} \\ &= U_{sp} \delta(1 - 2) \delta(1 - 3) \delta(1^+ - 4) \\ &\quad + U n_{-\sigma}(1) \delta(1 - 2) \left(\frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)}{\delta G_{\uparrow}(3, 4)} + \frac{\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)}{\delta G_{\downarrow}(3, 4)} \right) \end{aligned} \quad (\text{L.19})$$

Puisqu'on ne connaît pas $\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)/\delta G_{\sigma}(3, 4)$ on fait l'approximation que cette fonction est

proportionnelle à $\delta(1-3)\delta(1-4)$. On obtient alors la forme suivante

$$\Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) = U_{ch}\delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta(1^--2) \quad (\text{L.20})$$

Il s'agit de l'approximation la plus simple possible après la "random phase approximation", qui consiste à poser $U_{ch} = U$. Les résultats obtenus avec cette approximation peuvent servir à obtenir une meilleure approximation par la suite. C'est ce que nous faisons pour obtenir la conductivité optique comme on verra plus loin. En faisant cette approximation, on obtiendra une susceptibilité de charge régulière à toute température. Par contre la susceptibilité magnétique sera singulière à température nulle. Les corrélations magnétiques auront donc un effet beaucoup plus significatif sur le spectre à une particule que les corrélations de charge.

En remplaçant (L.20) dans (L.8) on obtient

$$\chi_+(1, 2|3, 4) = -2G(1, 3)G(4, 2) + U_{ch}G(1, \bar{2}^+)G(\bar{2}, 2)\chi_+(\bar{2}, \bar{2}^+|3, 4) \quad (\text{L.21})$$

Prenons maintenant le cas $2 = 1^+$ et $4 = 3^-$ dans cette expression, on obtient

$$\chi_+(1, 1^+|3^+, 3) = -2G(1, 3^+)G(3, 1^+) + U_{ch}G(1, \bar{2}^+)G(\bar{2}, 1^+)\chi_+(\bar{2}, \bar{2}^+|3^+, 3) \quad (\text{L.22})$$

En écrivant $\chi_+(1, 1^+|3^+, 3) = \chi_{ch}(1, 3)$ et faisant la transformée de Fourier de (L.22) on peut résoudre pour $\chi(q) = \chi(\mathbf{q}, iq_n)$ (voir l'annexe H) :

$$\chi_{ch}(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q)} \quad (\text{L.23})$$

et en remplaçant simplement U_{ch} par $-U_{sp}$ dans cette expression, on obtient la susceptibilité magnétique :

$$\chi_{sp}(q) = \frac{\chi_0(q)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q)} \quad (\text{L.24})$$

où $\chi_0(q)$ est la fonction de Lindhard donnée par

$$\chi_0(q) = -2\frac{T}{N} \sum_k G_0(k+q)G_0(k). \quad (\text{L.25})$$

On a ici posée que $G(1, 2) = G_0(1, 2)$, où $G_0(1, 2)$ est la fonction de Green sans interaction, dans (L.22) puisque la self-énergie (L.16) est locale dans l'espace et dans le temps

imaginaire, c'est-à-dire une constante dans l'espace réciproque. et n'a donc aucun effet sur la fonction de Green (elle est absorbée par le potentiel chimique).

Maintenant, en remplaçant (L.18) et (L.20) dans (L.10), on obtient une nouvelle approximation pour la self-énergie :

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, 2)_{long} = U G_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+) \delta(1 - 2) + \frac{U}{4} [U_{sp} \chi_{sp}(2, 1) + U_{ch} \chi_{ch}(2, 1)] G_{\sigma}^{(1)}(1, 2) \quad (L.26)$$

Cette expression est obtenue en considérant un champ source ϕ_{σ} diagonal en σ (dans la direction z). C'est ce qu'on appelle le canal longitudinal, où la fonction de Green est diagonale en spin et qui donne les corrélations de charge, $\chi_{ch}(1, 2) = \langle T_{\tau} n(1) n(2) \rangle - \langle n(1) \rangle \langle n(2) \rangle$, et de S_z , $\chi_{sp}(1, 2) = \langle T_{\tau} S_z(1) S_z(2) \rangle$. Maintenant si on fait le calcul de la self-énergie en utilisant un champ source dans une direction transverse : $\phi_{\sigma\sigma'} \neq 0$ lorsque $\sigma \neq \sigma'$, on obtient alors les corrélations transverses de spin, $\chi_{+-}(1, 2) = \langle T_{\tau} S_+(1) S_-(2) \rangle$ (et χ_{-+}). Dans ce cas la nouvelle self-énergie dans l'approximation TPSC est

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, 2)_{tr} = U G_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+) \delta(1 - 2) + \frac{U}{2} [U_{sp} \chi_{sp}(2, 1)] G_{-\sigma}^{(1)}(1, 2) \quad (L.27)$$

où on a utilisé le fait que $\chi_{+-}(1, 2) = \frac{1}{2} \chi_{sp}(1, 2)$ par invariance sous rotation du spin. L'indice tr indique qu'il s'agit du résultat pour le canal transverse. On obtient donc des résultats différents selon que l'approximation TPSC est utilisée dans le canal transverse ou longitudinal. Cette approximation n'est donc pas équivalente dans les deux canaux, c'est-à-dire qu'elle ne possède pas la symétrie de croisement, alors qu'une théorie exacte doit avoir cette symétrie. Afin de compenser pour ce "défaut" de la théorie, on symétrise la self-énergie en prenant la moyenne de ces deux résultats. La comparaison avec des résultats Monte-Carlo quantique montre que ce choix est le meilleur (ref...). On a donc

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1, 2) = U G_{-\sigma}^{(1)}(1, 1^+) \delta(1 - 2) + \frac{U}{8} [3U_{sp} \chi_{sp}(2, 1) + U_{ch} \chi_{ch}(2, 1)] G_{\sigma}^{(1)}(1, 2) \quad (L.28)$$

ou, dans l'espace réciproque,

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(k) = U n_{-\sigma} + \frac{U}{8} \frac{T}{N} \sum_q [3U_{sp} \chi_{sp}(q) + U_{ch} \chi_{ch}(q)] G_{\sigma}^{(1)}(k + q) \quad (L.29)$$

Pour calculer la fonction de corrélation *courant-courant* nous devons pouvoir calculer

la fonction $\chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4)$. Cette fonction peut s'écrire

$$\begin{aligned} \chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = & -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\ & - 2G^{(2)}(1, \bar{1}) \left(\frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} \right) G^{(2)}(\bar{2}, 2) \end{aligned} \quad (\text{L.30})$$

D'après (L.28), $\Sigma_\sigma^{(2)}$ est une fonction de $G_\sigma^{(1)}$. On peut donc écrire

$$\frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_{\sigma'}(3, 4)} = \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_{\sigma'}(3, 4)} \quad (\text{L.31})$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} &= \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} \\ &= \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \left(\frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} \right) \\ &\quad + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \left(\frac{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} \right) \end{aligned} \quad (\text{L.32})$$

c'est-à-dire, en utilisant l'invariance sous rotation du spin,

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} &= \left(\frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) \left(\frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} \right) \end{aligned} \quad (\text{L.33})$$

c'est-à-dire, d'après la définition (L.4),

$$\frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_\sigma(3, 4)} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta\phi_{-\sigma}(3, 4)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) \chi_+^{(1)}(\bar{3}, \bar{4}|3, 4) \quad (\text{L.34})$$

En remplaçant dans (L.30), on obtient

$$\begin{aligned} \chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = & -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\ & + G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2) \left(\frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_\sigma^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) \chi_+^{(1)}(\bar{3}, \bar{4}|3, 4) \end{aligned} \quad (\text{L.35})$$

et on a que

$$\begin{aligned} \chi_+^{(1)}(\bar{3}, \bar{4}|3, 4) = & -2G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\ & + G^{(1)}(\bar{3}, \bar{5})G^{(1)}(\bar{6}, \bar{4})\Gamma_{ch}^{(1)}(\bar{5}, \bar{6}, \bar{7}, \bar{8})\chi_+^{(1)}(\bar{7}, \bar{8}|3, 4) \\ = & -2G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) + U_{ch}G^{(1)}(\bar{3}, \bar{5})G^{(1)}(\bar{5}, \bar{4})\chi_+^{(1)}(\bar{5}, \bar{5}^+|3, 4) \end{aligned} \quad (\text{L.36})$$

Le second terme de cette expression ne contribuera pas à $\langle T_\tau j_x(\mathbf{q}, \tau) j_x(-\mathbf{q}) \rangle_0$ lorsque $\mathbf{q} = 0$ alors que c'est ce cas qui nous intéresse principalement. C'est d'ailleurs pour cette raison que l'on doit utiliser $\chi_+^{(2)}$. On ne conservera donc que le premier terme pour la suite.

On doit maintenant obtenir explicitement l'expression entre parenthèses dans le second terme de (L.35). De (L.28), on a

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Sigma_\sigma^{(2)}(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} = & U\delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta_{-\sigma, \sigma'} \\ & + \frac{U}{8}\delta(1-3)\delta(2-4)\delta_{\sigma\sigma'} [3U_{sp}(1)\chi_{sp}(2, 1) + U_{ch}(1)\chi_{ch}(2, 1)] \\ & + \frac{U}{8} \left[3\frac{\delta U_{sp}(1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)}\chi_{sp}(2, 1) + \frac{\delta U_{ch}(1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)}\chi_{ch}(2, 1) \right] G_\sigma^{(1)}(1, 2) \\ & + \frac{U}{8} G_\sigma^{(1)}(1, 2) \left[3U_{sp}(1)\frac{\delta\chi_{sp}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} + U_{ch}(1)\frac{\delta\chi_{ch}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{L.37})$$

Rappelons que $U_{sp}(1) = Ug_{\uparrow\downarrow}(1)$. Or pour passer de (L.19) à (L.20), nous avons fait l'approximation que $\delta g_{\uparrow\downarrow}(1)/\delta G_\sigma(3, 4)$ est proportionnel à $\delta(1-3)\delta(1-4)$. On a donc

$$\frac{\delta U_{sp}(1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)} = U'_{sp}(1)\delta(1-3)\delta(1-4) \quad (\text{L.38})$$

où $U'_{sp}(1)$ est une constante lorsque $\phi \rightarrow 0$. En faisant une approximation similaire pour

$\delta U_{ch}(1)/\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(2)}(1,2)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} &= U \delta(1-2) \delta(1-3) \delta(1^+-4) \delta_{-\sigma, \sigma'} \\ &+ \frac{U}{8} \delta(1-3) \delta(2-4) \delta_{\sigma \sigma'} [3U_{sp}(1) \chi_{sp}(2,1) + U_{ch}(1) \chi_{ch}(2,1)] \\ &+ \frac{U}{8} \delta(1-3) \delta(1-4) [3U'_{sp}(1) \chi_{sp}(2,1) + U'_{ch}(1) \chi_{ch}(2,1)] G_{\sigma}^{(1)}(1,2) \\ &+ \frac{U}{8} G_{\sigma}^{(1)}(1,2) \left[3U_{sp}(1) \frac{\delta \chi_{sp}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} + U_{ch}(1) \frac{\delta \chi_{ch}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} \right]. \quad (\text{L.39}) \end{aligned}$$

Maintenant on doit obtenir une expression explicite pour $\delta \chi_{ch/sp}(2,1)/\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)$. Pour ce faire on doit utiliser la formule

$$\begin{aligned} \chi_{ch}(2,1) &= -G_{\sigma}(2,1^+) G_{\sigma}(1,2^+) - G_{-\sigma}(2,1^+) G_{-\sigma}(1,2^+) \\ &+ \frac{1}{2} U_{ch}(\bar{2}) G_{\sigma}(2, \bar{2}^+) G_{\sigma}(\bar{2}, 2^+) \chi_{ch}(\bar{2}, 1) \\ &+ \frac{1}{2} U_{ch}(\bar{2}) G_{-\sigma}(2, \bar{2}^+) G_{-\sigma}(\bar{2}, 2^+) \chi_{ch}(\bar{2}, 1) \end{aligned} \quad (\text{L.40})$$

d'où

$$\begin{aligned} \frac{\delta \chi_{ch}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} &= -\delta(2-3) \delta(1^+-4) G_{\sigma'}(1,2^+) - G_{\sigma'}(2,1^+) \delta(1-3) \delta(2^+-4) \\ &+ \frac{1}{2} U_{ch} \delta(2-3) G_{\sigma'}(4,2) \chi_{ch}(4,1) + \frac{1}{2} U_{ch} \delta(2-4) G_{\sigma'}(2,3) \chi_{ch}(3,1) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\delta U_{ch}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} G_{\sigma}(2, \bar{2}^+) G_{\sigma}(\bar{2}, 2^+) \chi_{ch}(\bar{2}, 1) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\delta U_{ch}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} G_{-\sigma}(2, \bar{2}^+) G_{-\sigma}(\bar{2}, 2^+) \chi_{ch}(\bar{2}, 1) \\ &+ \frac{1}{2} U_{ch}(\bar{2}) G_{\sigma}(2, \bar{2}^+) G_{\sigma}(\bar{2}, 2^+) \frac{\delta \chi_{ch}(\bar{2}, 1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} \\ &+ \frac{1}{2} U_{ch}(\bar{2}) G_{-\sigma}(2, \bar{2}^+) G_{-\sigma}(\bar{2}, 2^+) \frac{\delta \chi_{ch}(\bar{2}, 1)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} \end{aligned} \quad (\text{L.41})$$

ou encore, en utilisant l'invariance sous rotation du spin

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \chi_{ch}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} &= -\delta(2-3)\delta(1^+-4)G(1, 2^+) - G(2, 1^+)\delta(1-3)\delta(2^+-4) \\
&+ \frac{1}{2}U_{ch}\delta(2-3)G(4, 2)\chi_{ch}(4, 1) + \frac{1}{2}U_{ch}\delta(2-4)G(2, 3)\chi_{ch}(3, 1) \\
&+ \frac{\delta U_{ch}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)}G(2, \bar{2}^+)G(\bar{2}, 2^+)\chi_{ch}(\bar{2}, 1) \\
&+ U_{ch}(\bar{2})G(2, \bar{2}^+)G(\bar{2}, 2^+)\frac{\delta \chi_{ch}(\bar{2}, 1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)}
\end{aligned} \tag{L.42}$$

Cette expression est de la forme

$$\begin{aligned}
F(2, 1; 3, 4) &= H(2, 1; 3, 4) + CG(2, \bar{2})G(\bar{2}, 2^+)F(\bar{2}, 1; 3, 4) \\
&= H(2, 1; 3, 4) - \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(2, 2^+; \bar{2}^+, \bar{2})F(\bar{2}, 1; 3, 4)
\end{aligned} \tag{L.43}$$

qui est la même forme que l'équation (H.4) excepté qu'ici la fonction F a un indice indépendant de plus. D'après (H.7) on peut directement écrire

$$\frac{\delta \chi_{ch}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} = \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2, \bar{1})H(\bar{1}, 1; 3, 4) \tag{L.44}$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \chi_{ch}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} &= \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2, \bar{1}) \left[-\delta(\bar{1}-3)\delta(1-4)G(1, \bar{1}) - G(\bar{1}, 1)\delta(1-3)\delta(\bar{1}-4) \right. \\
&+ \frac{1}{2}U_{ch}\delta(\bar{1}-3)G(4, \bar{1})\chi_{ch}(4, 1) + \frac{1}{2}U_{ch}\delta(\bar{1}-4)G(\bar{1}, 3)\chi_{ch}(3, 1) \\
&\quad \left. + \frac{\delta U_{ch}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)}G(\bar{1}, \bar{2}^+)G(\bar{2}, \bar{1}^+)\chi_{ch}(\bar{2}, 1) \right] \\
\frac{\delta \chi_{ch}(2, 1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} &= \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2, 3)G(4, 3) \left[-\delta(1-4) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(4, 1) \right] \\
&+ \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2, 4)G(4, 3) \left[-\delta(1-3) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(3, 1) \right] \\
&+ \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2, \bar{1})\frac{\delta U_{ch}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3, 4)}G(\bar{1}, \bar{2}^+)G(\bar{2}, \bar{1}^+)\chi_{ch}(\bar{2}, 1) \tag{L.45}
\end{aligned}$$

Pour $\delta\chi_{sp}(2,1)/\delta G_{\sigma'}(3,4)$ il suffit de prendre l'expression ci-dessus et de remplacer U_{ch} par $-U_{sp}$:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{sp}(2,1)}{\delta G_{\sigma'}(3,4)} = & \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,3)G(4,3)\left[-\delta(1-4) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(4,1)\right] \\ & + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,4)G(4,3)\left[-\delta(1-3) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(3,1)\right] \\ & - \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,\bar{1})\frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)}G(\bar{1},\bar{2}^+)G(\bar{2},\bar{1}^+)\chi_{sp}(\bar{2},1) \quad (\text{L.46}) \end{aligned}$$

Pour l'instant on négligera les termes qui les contiennent les dérivées fonctionnelles de U_{sp} et U_{ch} . Toutefois, comme montré dans l'annexe N, ces dérivées fonctionnelles peuvent être obtenues de façon exacte. En plaçant les expressions (L.45) et (L.46) dans (L.39), on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Sigma_{\sigma}^{(2)}(1,2)}{\delta G_{\sigma'}^{(1)}(3,4)} = & U\delta(1-2)\delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta_{-\sigma,\sigma'} \\ & + \frac{U}{8}\delta(1-3)\delta(2-4)\delta_{\sigma\sigma'}[3U_{sp}(1)\chi_{sp}(2,1) + U_{ch}(1)\chi_{ch}(2,1)] \\ & + \frac{U}{8}G^{(1)}(1,2)G^{(1)}(4,3)\left[3U_{sp}(1)\left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,3)\left[-\delta(1-4) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(4,1)\right] \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(2,4)\left[-\delta(1-3) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(3,1)\right]\right) \right. \\ & \quad \left. + U_{ch}(1)\left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2,3)\left[-\delta(1-4) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(4,1)\right] \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(2,4)\left[-\delta(1-3) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(3,1)\right]\right)\right] \quad (\text{L.47}) \end{aligned}$$

On a donc

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} &= U \delta(\bar{1} - \bar{2}) \delta(\bar{1} - \bar{3}) \delta(\bar{1}^+ - \bar{4}) \\
&\quad + \frac{U}{8} \delta(\bar{1} - \bar{3}) \delta(\bar{2} - \bar{4}) [3U_{sp} \chi_{sp}(\bar{2}, \bar{1}) + U_{ch} \chi_{ch}(\bar{2}, \bar{1})] \\
&\quad + \frac{U}{4} G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2}) G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3}) \left[3U_{sp} \left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right. \\
&\quad \left. + U_{ch} \left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0}(\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_{ch}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0}(\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_{ch}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right] \quad (L.48)
\end{aligned}$$

Si on revient à (L.35) et (L.36), on a

$$\begin{aligned}
\chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) &= -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\
&\quad - 2G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2) \left(\frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} + \frac{\delta \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\bar{1}, \bar{2})}{\delta G_{-\sigma}^{(1)}(\bar{3}, \bar{4})} \right) G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \quad (L.49)
\end{aligned}$$

et avec (L.48),

$$\begin{aligned}
\chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = & -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\
& - 2G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)U\delta(\bar{1} - \bar{2})\delta(\bar{1} - \bar{3})\delta(\bar{1}^+ - \bar{4})G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\
& - 2G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)\frac{U}{8}\delta(\bar{1} - \bar{3})\delta(\bar{2} - \bar{4})[3U_{sp}\chi_{sp}(\bar{2}, \bar{1}) + U_{ch}\chi_{ch}(\bar{2}, \bar{1})]G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\
& - 2G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)\frac{U}{4}G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2})G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3})\left[3U_{sp}\left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{3})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1})\right]\right.\right. \\
& \quad \left.\left. + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{4})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1})\right]\right)\right. \\
& \quad \left. + U_{ch}\left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{3})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{4}, \bar{1})\right]\right.\right. \\
& \quad \left.\left. + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{4})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{3}, \bar{1})\right]\right)\right]G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}). \quad (L.50)
\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
\chi_+^{(2)}(1, 2|3, 4) = & -2G^{(2)}(1, 3)G^{(2)}(4, 2) \\
& - 2UG^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{1}, 2)G^{(1)}(\bar{1}, 3)G^{(1)}(4, \bar{1}^+) \\
& - \frac{U}{4}G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)[3U_{sp}\chi_{sp}(\bar{2}, \bar{1}) + U_{ch}\chi_{ch}(\bar{2}, \bar{1})]G^{(1)}(\bar{1}, 3)G^{(1)}(4, \bar{2}) \\
& - \frac{U}{2}G^{(2)}(1, \bar{1})G^{(2)}(\bar{2}, 2)G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2})G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3})G^{(1)}(\bar{3}, 3)G^{(1)}(4, \bar{4}) \\
& \times \left[3U_{sp}\left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{3})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1})\right]\right.\right. \\
& \quad \left.\left. + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{4})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1})\right]\right)\right. \\
& \quad \left. + U_{ch}\left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{3})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{4}, \bar{1})\right]\right.\right. \\
& \quad \left.\left. + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0}(\bar{2}, \bar{4})\left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_{ch}(\bar{3}, \bar{1})\right]\right)\right]. \quad (L.51)
\end{aligned}$$

Maintenant, si on revient à la fonction de corrélation (L.5), on a

$$\chi_{j_x j_x}(1-2) = - \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \chi_+(2 + \delta_2, 2 | 1, 1 + \delta_1) \quad (\text{L.52})$$

où $1 + \delta_1 = (\mathbf{r}_1 + \delta_1, \tau_1)$. En utilisant (L.50), on obtient

$$\begin{aligned} \chi_{j_x j_x}(1-2) = & 2 \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} G^{(2)}(2 + \delta_2, 1) G^{(2)}(1 + \delta_1, 2) \\ & + 2U \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} G^{(2)}(2 + \delta_2, \bar{1}) G^{(2)}(\bar{1}, 2) G^{(1)}(\bar{1}, 1) G^{(1)}(1 + \delta_1, \bar{1}^+) \\ & + \frac{U}{4} \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} G^{(2)}(2 + \delta_2, \bar{1}) G^{(2)}(\bar{2}, 2) G^{(1)}(\bar{1}, 1) G^{(1)}(1 + \delta_1, \bar{2}) \\ & \quad \times [3U_{sp} \chi_{sp}(\bar{2}, \bar{1}) + U_{ch} \chi_{ch}(\bar{2}, \bar{1})] \\ & + \frac{U}{2} \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} G^{(2)}(2 + \delta_2, \bar{1}) G^{(2)}(\bar{2}, 2) G^{(1)}(\bar{3}, 1) G^{(1)}(1 + \delta_1, \bar{4}) \\ & \quad \times G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2}) G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3}) \left[3U_{sp} \left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right. \\ & \quad \left. + U_{ch} \left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_{ch}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_{ch}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{L.53})$$

On doit maintenant obtenir la transformée de Fourier de cette expression. Notons d'abord que

$$\delta_x t_\delta = \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}. \quad (\text{L.54})$$

Pour le premier terme, on a donc

$$\begin{aligned}
\chi_{JxJx}(1-2)_1 &= -2 \sum_{\delta_1 \delta_2} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_3, k_4} G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_4) \\
&\quad \times e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \delta_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \delta_2} e^{ik_3 \cdot (2+\delta_2-1)} e^{ik_4 \cdot (1+\delta_1-2)} \\
&= -2 \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_3, k_4} G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_4) \\
&\quad \times e^{ik_3 \cdot (2-1)} e^{ik_4 \cdot (1-2)} \sum_{\delta_1 \delta_2} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) \cdot \delta_1} e^{i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \cdot \delta_2} \\
&= -2 \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, k_3} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_3) G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(-k_1) e^{-i(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_1) \cdot (1-2)} \\
&= -2 \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_3, q} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{q}) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_3) G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_3 - q) e^{-iq \cdot (1-2)}
\end{aligned} \tag{L.55}$$

donc

$$\chi_{JxJx}(q)_1 = -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) G^{(2)}(k) G^{(2)}(k - q). \tag{L.56}$$

Le dernier terme de (L.53) s'écrit

$$\begin{aligned}
\chi_{JxJx}(1-2)_4 &= \frac{U}{2} \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} G^{(2)}(2 + \delta_2, \bar{1}) G^{(2)}(\bar{2}, 2) G^{(1)}(\bar{3}, 1) G^{(1)}(1 + \delta_1, \bar{4}) \\
&\quad \times G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2}) G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3}) \left[3U_{sp} \left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right. \\
&\quad \left. + U_{ch} \left(\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{3}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{4}) + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_{ch}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0} (\bar{2}, \bar{4}) \left[-\delta(\bar{1} - \bar{3}) + \frac{1}{2} U_{ch} \chi_{ch}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \right].
\end{aligned} \tag{L.57}$$

Pour la TF, nous allons prendre uniquement la partie *spin* entre les crochets. On utilisera

aussi la substitution $\bar{\chi}_{sp} \equiv \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}$. On a

$$\begin{aligned}
 & \chi_{JxJx}(1-2)_{sp4} \\
 &= \frac{U}{2} \sum_{\delta_1 \delta_2} \delta_{x1} \delta_{x2} t_{\delta_1} t_{\delta_2} \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} G^{(2)}(2 + \delta_2, \bar{1}) G^{(2)}(\bar{2}, 2) G^{(1)}(\bar{3}, 1) G^{(1)}(1 + \delta_1, \bar{4}) \\
 & \times G^{(1)}(\bar{1}, \bar{2}) G^{(1)}(\bar{4}, \bar{3}) (3U_{sp}) \left(\bar{\chi}_{sp}(\bar{2}, \bar{3}) \left[-2\delta(\bar{1} - \bar{4}) - U_{sp} \chi_{sp}(\bar{4}, \bar{1}) \right] \right. \\
 & \quad \left. + \bar{\chi}_{sp}(\bar{2}, \bar{4}) \left[-2\delta(\bar{1} - \bar{3}) - U_{sp} \chi_{sp}(\bar{3}, \bar{1}) \right] \right) \\
 &= -\frac{U}{2} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) \left(\frac{T}{N} \right)^8 \sum_{k_3, k_8, q_1, q_2} G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_4) G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_6) \\
 & \times G^{(1)}(k_7) G^{(1)}(k_8) (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_2) \right] \\
 & \times \sum_{\delta_1 \delta_2} e^{i\mathbf{k}_1 \delta_1} e^{i\mathbf{k}_2 \delta_2} \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} e^{ik_3(2+\delta_2-\bar{1})} e^{ik_4(\bar{2}-2)} e^{ik_5(\bar{3}-1)} e^{ik_6(1+\delta_1-\bar{4})} e^{ik_7(\bar{1}-\bar{2})} e^{ik_8(\bar{4}-\bar{3})} \\
 & \quad \times e^{iq_1(\bar{2}-\bar{3})} e^{iq_2(\bar{4}-\bar{1})} \\
 & - \frac{U}{2} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) \left(\frac{T}{N} \right)^8 \sum_{k_3, k_8, q_1, q_2} G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_4) G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_6) \\
 & \times G^{(1)}(k_7) G^{(1)}(k_8) (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_2) \right] \\
 & \times \sum_{\delta_1 \delta_2} e^{i\mathbf{k}_1 \delta_1} e^{i\mathbf{k}_2 \delta_2} \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} e^{ik_3(2+\delta_2-\bar{1})} e^{ik_4(\bar{2}-2)} e^{ik_5(\bar{3}-1)} e^{ik_6(1+\delta_1-\bar{4})} e^{ik_7(\bar{1}-\bar{2})} e^{ik_8(\bar{4}-\bar{3})} \\
 & \quad \times e^{iq_1(\bar{2}-\bar{4})} e^{iq_2(\bar{3}-\bar{1})} .
 \end{aligned} \tag{L.58}$$

D'abord, on a

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\delta_1 \delta_2} e^{i\mathbf{k}_1 \delta_1} e^{i\mathbf{k}_2 \delta_2} \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} e^{ik_3(2+\delta_2-\bar{1})} e^{ik_4(\bar{2}-2)} e^{ik_5(\bar{3}-1)} e^{ik_6(1+\delta_1-\bar{4})} e^{ik_7(\bar{1}-\bar{2})} e^{ik_8(\bar{4}-\bar{3})} e^{iq_1(\bar{2}-\bar{3})} e^{iq_2(\bar{4}-\bar{1})} \\
 &= e^{-i(k_4-k_3)2} e^{i(k_6-k_5)1} \sum_{\delta_1, \delta_2} e^{i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_6) \delta_1} e^{i(\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3) \delta_2} \\
 & \times \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} e^{i(-k_3+k_7-q_2)\bar{1}} e^{i(k_4-k_7+q_1)\bar{2}} e^{i(k_5-k_8-q_1)\bar{3}} e^{i(-k_6+k_8+q_2)\bar{4}} .
 \end{aligned} \tag{L.59}$$

ce qui donne un facteur $N^2(\frac{N}{T})^4$, $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_3$, $k_7 = k_3 + q_2$, $k_4 = k_3 + q_2 - q_1$, $k_8 = k_5 - q_1$,

$k_6 = k_5 - q_1 + q_2$ et $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_5 + \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2$. Le premier terme de (L.58) s'écrit

$$-\frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^4 \sum_{k_3, k_5, q_1, q_2} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x} (-\mathbf{k}_5 + \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x} (-\mathbf{k}_3) G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_3 + q_2 - q_1) G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_5 - q_1 + q_2) \\ \times G^{(1)}(k_3 + q_2) G^{(1)}(k_5 - q_1) (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_2) \right] e^{i(q_2 - q_1)(1-2)}. \quad (\text{L.60})$$

Pour le second terme de (L.58)

$$\sum_{\delta_1 \delta_2} e^{i\mathbf{k}_1 \delta_1} e^{i\mathbf{k}_2 \delta_2} \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} e^{i\mathbf{k}_3 (2+\delta_2-\bar{1})} e^{i\mathbf{k}_4 (\bar{2}-2)} e^{i\mathbf{k}_5 (\bar{3}-1)} e^{i\mathbf{k}_6 (1+\delta_1-\bar{4})} e^{i\mathbf{k}_7 (\bar{1}-\bar{2})} e^{i\mathbf{k}_8 (\bar{4}-\bar{3})} e^{iq_1 (\bar{2}-\bar{4})} e^{iq_2 (\bar{3}-\bar{1})} \\ = e^{-i(k_4 - k_3)2} e^{i(k_6 - k_5)1} \sum_{\delta_1 \delta_2} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_6) \delta_1} e^{i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \delta_2} \\ \times \sum_{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}} e^{i(-k_3 + k_7 - q_2) \bar{1}} e^{i(k_4 - k_7 + q_1) \bar{2}} e^{i(k_5 - k_8 + q_2) \bar{3}} e^{i(-k_6 + k_8 - q_1) \bar{4}} \quad (\text{L.61})$$

d'où $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_3$, $k_7 = k_3 + q_2$, $k_4 = k_3 + q_2 - q_1$, $k_8 = k_5 + q_2$, $k_6 = k_5 - q_1 + q_2$ et $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_5 + \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2$.

Le second terme de (L.58) s'écrit donc

$$-\frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^4 \sum_{k_3, k_5, q_1, q_2} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x} (-\mathbf{k}_5 + \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x} (-\mathbf{k}_3) G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_3 + q_2 - q_1) G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_5 - q_1 + q_2) \\ \times G^{(1)}(k_3 + q_2) G^{(1)}(k_5 + q_2) (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_2) \right] e^{i(q_2 - q_1)(1-2)} \quad (\text{L.62})$$

et on obtient

$$\chi_{J_x J_x} (1-2)_{sp4} = -\frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^4 \sum_{k_3, k_5, q_1, q_2} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x} (-\mathbf{k}_5 + \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x} (-\mathbf{k}_3) \\ \times G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_3 + q_2 - q_1) G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_5 - q_1 + q_2) \\ \times G^{(1)}(k_3 + q_2) \left[G^{(1)}(k_5 + q_2) + G^{(1)}(k_5 - q_1) \right] \\ \times (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_2) \right] e^{i(q_2 - q_1)(1-2)}. \quad (\text{L.63})$$

En posant $q' = q_2 - q_1$ on obtient

$$\begin{aligned}
 \chi_{j_x j_x}(1-2)_{sp4} = & -\frac{U}{2} \left(\frac{T}{N}\right)^4 \sum_{k_3, k_5, q_1, q'} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(-\mathbf{k}_5 - \mathbf{q}') \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(-\mathbf{k}_3) \\
 & \times G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_3 + q') G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_5 + q') \\
 & \times G^{(1)}(k_3 + q_1 + q') [G^{(1)}(k_5 + q_1 + q') + G^{(1)}(k_5 - q_1)] \\
 & \times (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_1 + q') \right] e^{iq' \cdot (1-2)}
 \end{aligned} \tag{L.64}$$

et donc

$$\begin{aligned}
 \chi_{j_x j_x}(q)_{sp4} = & -\frac{U}{2} \left(\frac{T}{N}\right)^3 \sum_{k_3, k_5, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_5 + \mathbf{q}) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_3) \\
 & \times G^{(2)}(k_3) G^{(2)}(k_3 + q) G^{(1)}(k_5) G^{(1)}(k_5 + q) \\
 & \times G^{(1)}(k_3 + q_1 + q) [G^{(1)}(k_5 + q_1 + q) + G^{(1)}(k_5 - q_1)] \\
 & \times (3U_{sp}) \bar{\chi}_{sp}(q_1) \left[-1 - \frac{1}{2} U_{sp} \chi_{sp}(q_1 + q) \right].
 \end{aligned} \tag{L.65}$$

En ajoutant la partie *charge*, on obtient

$$\begin{aligned}
 \chi_{j_x j_x}(q)_4 = & \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N}\right)^3 \sum_{k_1, k_2, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + q) \\
 & \times G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + q) G^{(1)}(k_1 + q_1 + q) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + q) + G^{(1)}(k_2 - q_1)] \\
 & \times \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \left[1 + \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(q_1 + q) \right] \right. \\
 & \quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \left[1 - \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(q_1 + q) \right] \right)
 \end{aligned} \tag{L.66}$$

Finalement, l'expression de la fonction de corrélation *courant-courant* est

$$\begin{aligned}
\chi_{j_x j_x}(q) = & \frac{-2T}{N} \sum_k G^{(2)}(k) G^{(2)}(k+q) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k+q) \\
& - \frac{U}{4} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1 k_2} G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 - q) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 - q) \\
& \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_1 - q) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_2) [3U_{sp} \chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch} \chi_{ch}(k_2 - k_1)] \\
& + \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^3 \sum_{k_1, k_2, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_2 + q) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + q) \\
& \times G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + q) G^{(1)}(k_1 + q_1 + q) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + q) + G^{(1)}(k_2 - q_1)] \\
& \times \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \left[1 + \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(q_1 + q) \right] \right. \\
& \quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \left[1 - \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(q_1 + q) \right] \right)
\end{aligned} \tag{L.67}$$

ou encore, à $\mathbf{q} = 0$,

$$\begin{aligned}
 \chi_{J_x J_x}(iq_n) &= \frac{-2T}{N} \sum_k \left(\frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k) \right)^2 G^{(2)}(k) G^{(2)}(k + iq_n) \\
 &- \frac{U}{4} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1 k_2} G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) \\
 &\frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_1) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_2) [3U_{sp} \chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch} \chi_{ch}(k_2 - k_1)] \\
 &+ \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^3 \sum_{k_1, k_2, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_1) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k_2) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \\
 &\times G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1)] \\
 &\times G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right. \\
 &\quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right)
 \end{aligned} \tag{L.68}$$

puisque

$$\begin{aligned}
 1 + \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(q) &= \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q)} \\
 1 - \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(q) &= \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q)}.
 \end{aligned} \tag{L.69}$$

Annexe M

Techniques de calcul

M.1 Calcul de la self-énergie TPSC

Réécrivons l'expression de la self-énergie (L.29) :

$$\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = Un_{-\sigma} + \frac{U}{8} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (\text{M.1})$$

Préalablement au calcul de Σ à l'aide de cette expression on doit calculer U_{sp} , χ_{sp} , U_{ch} et χ_{ch} . Selon (L.24) et (L.23), la connaissance de la fonction de Lindhard :

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} G^{(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n), \quad (\text{M.2})$$

et de U_{sp} et U_{ch} nous donne χ_{sp} et χ_{ch} . On calcule donc d'abord χ_0 , ce qui permet ensuite d'obtenir U_{sp} et donc $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ par la condition d'autocohérence

$$\begin{aligned} \chi_{sp}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0) &= \langle n \rangle - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \\ &= \langle n \rangle - 2 \frac{U_{sp}}{U} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle \\ &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \end{aligned} \quad (\text{M.3})$$

où on a utilisé

$$U_{sp} = U \frac{\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle}, \quad (\text{M.4})$$

et U_{ch} par

$$\begin{aligned}\chi_{ch}(\mathbf{r} = 0, \tau = 0) &= \langle n \rangle + 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - \langle n \rangle^2 \\ &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}.\end{aligned}\quad (\text{M.5})$$

Il y a plusieurs façon de calculer la fonction de Lindhard (M.2). D'une part, si $G^{(1)} = G^{(0)}$ on peut faire la somme sur les fréquences ik_n analytiquement pour obtenir

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{iq_n + \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (\text{M.6})$$

où $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_0$. On doit alors faire l'intégrale sur \mathbf{k} pour chaque valeur de \mathbf{q} et iq_n . D'autre part l'expression (M.2) est une convolution qui s'écrit aussi comme

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \int d\tau e^{iq_n \tau} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau). \quad (\text{M.7})$$

L'avantage d'utiliser cette expression est que l'on peut utiliser des transformées de Fourier rapides (TFR) pour calculer $G(\mathbf{r}, \tau)$ à partir de $G(\mathbf{k}, \tau)$ et ensuite $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ connaissant $G(\mathbf{r}, \tau)$. Supposons que l'on veut calculer $N_{\mathbf{q}} N_{q_n}$ valeurs de $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$. En utilisant l'expression (M.6) on doit faire $N_{\mathbf{q}} N_{q_n}$ sommes sur $N_{\mathbf{k}}$ valeurs de \mathbf{k} . Si $N_{\mathbf{k}} = N_{\mathbf{q}}$ ce calcul croît comme $N_{\mathbf{q}}^2 N_{q_n}$. En utilisant l'expression (M.7) on doit calculer $G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$ à partir de $G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)$, ce qui croît comme $N_{\tau} N_{\mathbf{k}} \log(N_{\mathbf{k}})$. Ensuite le calcul des $N_{\mathbf{q}} N_{q_n}$ valeurs de $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ croît comme $N_{\mathbf{q}} N_{q_n} \log(N_{\mathbf{q}} N_{q_n})$. Donc, avec $N_{\tau} = N_{q_n}$, ce calcul nécessite un nombre d'opérations proportionnel à $N_{\mathbf{q}} N_{q_n} \log(N_{\mathbf{q}}^2 N_{q_n})$. Utiliser l'expression (M.7) est donc $C N_{\mathbf{q}} / \log(N_{\mathbf{q}}^2 N_{q_n})$ fois plus rapide que d'utiliser (M.6), où C est le rapport du nombre d'opérations arithmétiques nécessaires dans chacune des deux méthodes pour calculer un terme de la somme. Dans le cas où on ne peut pas faire la somme sur les fréquences ik_n analytiquement dans (M.2), la méthode "force brute" croît comme $N_{\mathbf{q}}^2 N_{q_n}^2$ alors que (M.7) croît comme $N_{\mathbf{q}} N_{q_n} \log(N_{\mathbf{q}} N_{q_n})$. Utiliser directement (M.2) est donc $C' N_{\mathbf{q}} N_{q_n} / \log(N_{\mathbf{q}} N_{q_n})$ fois plus lent que (M.7).

Maintenant, les TFR sont des transformées discrètes alors que (M.7) contient une transformée continue. Or si l'on approxime la TF sur τ par une TF discrète, on obtient un fonction périodique en iq_n alors que $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ doit plutôt décroître comme $1/q_n^2$ à haute fréquence. Ce qu'on peut faire dans ce cas est d'approximer la dépendance sur τ de $\chi_0(\mathbf{q}, \tau)$ par une spline cubique et ensuite utiliser la méthode décrite à l'annexe J pour

obtenir la TF d'une spline cubique. On devra alors calculer $\partial\chi_0(\mathbf{q}, \tau)/\partial\tau$ à $\tau = 0$ pour imposer les bonnes conditions aux frontières. On a, pour $0 < \tau < \beta$,

$$\begin{aligned} G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau) &= -e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(-\xi_{\mathbf{k}}) \\ &= -e^{\xi_{\mathbf{k}}(\beta-\tau)} f(\xi_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (\text{M.8})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial\tau} &= \xi_{\mathbf{k}} e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(-\xi_{\mathbf{k}}) \\ &= \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}(\beta-\tau)} f(\xi_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (\text{M.9})$$

et donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{-\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(-\xi_{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}(\beta-\tau)} f(\xi_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (\text{M.10})$$

Ensuite, toujours pour $0 < \tau < \beta$,

$$G^{(1)}(\mathbf{k}, -\tau) = e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}) \quad (\text{M.11})$$

$$\frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{k}, -\tau)}{\partial\tau} = \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}) \quad (\text{M.12})$$

$$\frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial\tau} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}). \quad (\text{M.13})$$

Si on a la symétrie d'inversion, on a

$$G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau) = G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau), \quad (\text{M.14})$$

et donc

$$\frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial\tau} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \xi_{\mathbf{k}} e^{\xi_{\mathbf{k}}\tau} f(\xi_{\mathbf{k}}). \quad (\text{M.15})$$

Il suffit donc de calculer $\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)/\partial\tau$ pour $0 < \tau < \beta$ et on a $\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)/\partial\tau$ par

$$\frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial\tau} = -\frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \beta - \tau)}{\partial\tau}. \quad (\text{M.16})$$

Finalement

$$\frac{\partial \chi_0(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} = -2 \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau) + G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) \frac{\partial G^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial \tau} \right) \quad (\text{M.17})$$

Maintenant, avant de calculer $\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$, on doit encore calculer U_{sp} et U_{ch} . On pourrait utiliser directement les règles de somme (M.3) et (M.5). Toutefois on sait que, dans la phase paramagnétique,

$$\chi_{sp/ch}(iq_n) \xrightarrow{iq_n \rightarrow \infty} \chi_0(iq_n) \quad (\text{M.18})$$

et que

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = n - 2 \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle = n - \frac{n^2}{2} \quad (\text{M.19})$$

puisque $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$. Donc on utilise plutôt les règles de somme suivantes

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)] &= -2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle + \frac{n^2}{2} \\ &= -2 \frac{U_{sp}}{U} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle + \frac{n^2}{2} \\ &= \frac{n^2}{2} \left(1 - \frac{U_{sp}}{U} \right), \end{aligned} \quad (\text{M.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)] &= 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - \frac{n^2}{2} \\ &= 2 \frac{U_{sp}}{U} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle - \frac{n^2}{2} \\ &= \frac{n^2}{2} \left(\frac{U_{sp}}{U} - 1 \right) \end{aligned} \quad (\text{M.21})$$

pour lesquelles les sommes sur iq_n convergent beaucoup plus rapidement puisque, à haute fréquence, les termes décroissent comme $1/q_n^4$ plutôt que comme $1/q_n^2$ comme dans (M.3) et (M.5).

Notons que l'approximation (M.4), qui découle de l'approximation suivante :

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}(1, \bar{2}) G_{\sigma}(\bar{2}, 3) &= -U \langle T_{\tau} c_{-\sigma}^{\dagger}(1) c_{-\sigma}(1) c_{\sigma}(1) c_{\sigma}^{\dagger}(3) \rangle \\ &\approx U \frac{\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle} G_{-\sigma}(1, 1^+) G_{\sigma}(1, 3), \end{aligned} \quad (\text{M.22})$$

est faite en supposant que c_σ et c_σ^\dagger sont des opérateurs d'annihilation et de création de *particule*. D'autre part, on pourrait effectuer une transformation *particule-trou* sur l'Hamiltonien de Hubbard et on obtiendrait la même identité à la première ligne de (M.22), à la différence que c_σ et c_σ^\dagger seraient des opérateurs d'annihilation et de création de *trou*. En effet, la transformation *particule-trou* sur le modèle de Hubbard sur un réseau carré ne fait que modifier le signe de certains termes de saut et ajouter une constante à l'Hamiltonien. Donc si on fait la même approximation après cette transformation on obtient

$$U_{sp} = U \frac{\langle n_\uparrow^t n_\downarrow^t \rangle}{\langle n_\uparrow^t \rangle \langle n_\downarrow^t \rangle}, \quad (\text{M.23})$$

où $n_\sigma^t = 1 - n_\sigma$ est le nombre de trous de spin σ sur un site. Si on réécrit U_{sp} avec les opérateurs de particule, on obtient

$$U_{sp} = U \frac{\langle (1 - n_\uparrow)(1 - n_\downarrow) \rangle}{\langle 1 - n_\uparrow \rangle \langle 1 - n_\downarrow \rangle}. \quad (\text{M.24})$$

Utiliser cette définition plutôt que la définition (M.4) revient simplement à remplacer n par $2 - n$ dans la dernière ligne de (M.20) et (M.21). Maintenant, il faut déterminer dans quelles situations doit-on utiliser l'une ou l'autre des définitions (M.4) et (M.24). Il s'est avéré, en comparant la double occupation obtenue de ces deux définitions avec la double occupation obtenue par la méthode Monte-Carlo quantique, que le meilleur accord est obtenu avec (M.4) dans le cas du dopage aux trous et avec (M.24) pour le dopage aux électrons (ref...). Autrement dit, l'approximation (M.22) est bonne lorsque $n(n^t) < 1$.

Finalement, nous arrivons au calcul de la self-énergie elle-même. Lorsque l'on connaît χ_0 , U_{sp} et U_{ch} , on peut obtenir $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)$ par l'expression (M.1). Toutefois, cette expression est aussi une convolution et s'exprime comme

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = Un_{-\sigma} + \frac{U}{8} \int d\tau e^{ik_n\tau} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [3U_{sp}\chi_{sp}(-\mathbf{r}, -\tau) + U_{ch}\chi_{ch}(-\mathbf{r}, -\tau)] G_\sigma^{(1)}(\mathbf{r}, \tau). \quad (\text{M.25})$$

ou encore

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = Un_{-\sigma} + \frac{U}{8} \int d\tau e^{ik_n\tau} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(-\mathbf{r}, -\tau) G_\sigma^{(1)}(\mathbf{r}, \tau), \quad (\text{M.26})$$

où

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}, \tau) &= 3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{r}, \tau) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{r}, \tau) \\ &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-iq_n\tau} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] . \end{aligned} \quad (\text{M.27})$$

Encore une fois on peut utiliser le fait que χ_{sp} et χ_{ch} s'approchent asymptotiquement de χ_0 à haute fréquence pour faire converger plus rapidement la transformée de Fourier (M.27). On utilise plutôt

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}, \tau) &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-iq_n\tau} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) - (3U_{sp} + U_{ch})\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)] \\ &\quad - 2(3U_{sp} + U_{ch}) G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) G_{\sigma}^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau) . \end{aligned} \quad (\text{M.28})$$

Encore une fois, il y a une TF continue sur τ dans l'expression (M.26). Il faut donc utiliser des splines cubiques pour représenter la dépendance en τ de $\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ et faire la TF en utilisant la méthode expliquée dans l'annexe J. On doit, pour ce faire, calculer $\partial V(\mathbf{r}, \tau)/\partial\tau$ pour $\tau = 0$. D'après (M.28), on a

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial V(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} \right|_{\tau=0} &= \left(\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} (-iq_n) e^{-iq_n\tau} [3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) \right. \\ &\quad \left. - (3U_{sp} + U_{ch})\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)] \right) \Big|_{\tau=0} \\ &\quad - 2(3U_{sp} + U_{ch}) \left[\frac{\partial G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} G_{\sigma}^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau) + G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) \frac{\partial G_{\sigma}^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial\tau} \right]_{\tau=0} , \end{aligned} \quad (\text{M.29})$$

or la fonction $3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) - (3U_{sp} + U_{ch})\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ est paire et décroît comme $1/q_n^4$ à haute fréquence. Donc pour $\tau = 0$ la somme sur q_n est nulle. On obtient donc

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial V(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} \right|_{\tau=0} &= (3U_{sp} + U_{ch}) \left. \frac{\partial \chi_0(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} \right|_{\tau=0} \\ &= -2(3U_{sp} + U_{ch}) \left[\frac{\partial G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} G_{\sigma}^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau) + G_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) \frac{\partial G_{\sigma}^{(1)}(-\mathbf{r}, -\tau)}{\partial\tau} \right]_{\tau=0} . \end{aligned} \quad (\text{M.30})$$

En lisant l'annexe J, on constate que ce résultat tient du fait que le coefficient de $1/q_n^2$ dans le développement à haute fréquence d'une fonction ne dépend que des dérivées à $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ et que χ_{sp} et χ_{ch} ont le même comportement à haute fréquence que χ_0 .

Finalement, $\frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau}$ est donnée par (M.10). on connaît donc la dérivée par rapport à τ de $V(-\mathbf{r}, -\tau)G_\sigma^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$ et on peut calculer la TF sur τ dans l'expression (M.25) avec la méthode de l'annexe J.

En résumé, pour calculer $\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ de façon rapide et précise on doit faire la TF sur \mathbf{k} pour chaque valeur de τ pour obtenir $G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)$, une seule TF sur \mathbf{k} pour obtenir $\frac{\partial G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau}$ à $\tau = 0$, les TF sur \mathbf{r} et τ pour obtenir $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$, incluant le calcul des splines pour chaque valeur de \mathbf{q} dans $\chi_0(\mathbf{q}, \tau)$, et les TF sur \mathbf{r} et τ pour obtenir $\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$, incluant le calcul des plines pour chaque valeur de \mathbf{k} dans $\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$. Rappelons que la transformée de Fourier rapide de taille N nécessite un nombre d'opérations proportionnel à $N \log(N)$ et donc le nombre d'opérations à faire pour obtenir $\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ est environ proportionnel à $N_{\mathbf{k}} N_{k_n} \log(N_{\mathbf{k}} N_{k_n})$.

M.2 Calcul de $\langle k_x \rangle_0$

D'après l'équation (1.69),

$$\langle k_x \rangle_0 = \frac{2T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_n} e^{ik_n \eta} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \sum_{\delta} \delta_x^2 t_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta}, \quad (\text{M.31})$$

où le facteur 2 vient de la somme sur σ dans le cas paramagnétique et $\eta = 0^+$. On a

$$\sum_{\delta} \delta_x^2 t_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} = -\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} \sum_{\delta} t_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta} = -\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} \epsilon(\mathbf{k}), \quad (\text{M.32})$$

et on obtient

$$\langle k_x \rangle_0 = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \epsilon(\mathbf{k})}{\partial k_x^2} T \sum_{ik_n} e^{ik_n \eta} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n), \quad (\text{M.33})$$

où la somme sur ik_n est en fait $n_{\mathbf{k}} = G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau = 0^-)$, l'élément à $\tau = 0^-$ de la transformée de Fourier (TF) sur la fréquence de $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$. Le calcul de cette TF est expliqué dans la section M.3.

M.3 Calcul de $\chi_{j_x j_x}(\mathbf{q} = 0, iq_n)$

Pour $\mathbf{q} = 0$, le premier terme de (L.67) s'écrit

$$\chi_{j_x j_x}(0, iq_n)_1 = \frac{-2T}{N} \sum_k \left(\frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k) \right)^2 \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n). \quad (\text{M.34})$$

La somme sur ik_m est une convolution, on peut donc utiliser les transformées de Fourier rapides pour la faire :

$$\begin{aligned} T \sum_m G_k(ik_m) G_k(ik_m + iq_n) &= T \sum_m \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{ik_m \tau_1} e^{i(k_m + q_n) \tau_2} G_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \\ &= T \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{iq_n \tau_2} G_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \sum_n e^{ik_m(\tau_1 + \tau_2)} \\ &= T \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{iq_n \tau_2} G_k(\tau_1) G_k(\tau_2) \beta \delta(\tau_1 + \tau_2) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{-iq_n \tau} G_k(\tau) G_k(-\tau). \end{aligned} \quad (\text{M.35})$$

On obtient donc

$$\chi_{j_x j_x}(0, iq_n)_1 = \frac{-2}{N} \sum_k \left(\frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(k) \right)^2 \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) G^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau). \quad (\text{M.36})$$

Les transformées de Fourier (TF) de $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m)$ et de $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau_j) G^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau_j)$ se font par transformées de Fourier rapide. La TF d'une fonction de Green $G(\mathbf{k}, ik_m)$ sur une plage finie de fréquences est

$$\begin{aligned} \bar{G}(\mathbf{k}, \tau) &= T \sum'_{ik_n} e^{-ik_n \tau} G(\mathbf{k}, ik_n) \\ \bar{G}(\mathbf{k}, \tau_j) &= T \sum'_n e^{-i(2n+1)\pi j/N_\tau} G(\mathbf{k}, ik_n) \\ &= e^{-i\pi j/N_\tau} T \sum_{n=-\frac{N_\tau}{2}}^{\frac{N_\tau}{2}-1} e^{-i2\pi n j/N_\tau} G(\mathbf{k}, ik_n) \\ &= e^{-i\pi j/N_\tau} T \sum_{n=0}^{N_\tau-1} e^{-i2\pi(n-\frac{N_\tau}{2})j/N_\tau} G(\mathbf{k}, ik_{n-\frac{N_\tau}{2}}) \\ \bar{G}(\mathbf{k}, \tau_j) &= e^{i\pi(N_\tau-1)j/N_\tau} T \sum_{n=0}^{N_\tau-1} e^{-i2\pi n j/N_\tau} G(\mathbf{k}, ik_{n-\frac{N_\tau}{2}}). \end{aligned} \quad (\text{M.37})$$

où \sum' indique une somme finie. Par contre cette transformée converge très lentement lorsque τ est près de 0 ou β . En effet, la fonction $G_k(\tau)$ doit être discontinue à $\tau = 0$ et anti-périodique sur β alors que la somme dans (M.37) est périodique de période β . Par conséquent on observe des oscillations dans la fonction (M.37) près de $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ ainsi que le phénomène de Gibbs. Pour corriger ce problème dans le calcul de $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$, on prolonge la fonction $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ au-delà de la fréquence de coupure par sa forme asymptotique :

$$G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \Sigma_{inf}(\mathbf{k}, ik_n)} \quad (\text{M.38})$$

où Σ_{inf} est la forme asymptotique de la self-énergie. Comme décrit dans la section M.1, la self-énergie est calculée par transformées de Fourier en utilisant des splines cubiques pour représenter $\Sigma(\mathbf{k}, \tau)$. Or d'après l'annexe J, la TF d'une spline cubique nous donne directement la forme asymptotique de la fonction jusqu'au terme en $1/(ik_n)^3$. On obtient donc

$$G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{s_1}{ik_n} + \frac{s_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{s_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3} \right)} \quad (\text{M.39})$$

dont la TF est obtenue en utilisant

$$T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} g(ik_m) = \begin{cases} -\sum_j \text{Res}[g(z)] f(-z_j) e^{-z_j \tau}, & 0 < \tau < \beta, \\ \sum_j \text{Res}[g(z)] f(z_j) e^{-z_j \tau}, & -\beta < \tau < 0, \end{cases} \quad (\text{M.40})$$

qui découle le théorème des résidus. On trouve

$$G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = -\sum_{j=1}^4 e^{-z_j(\mathbf{k})\tau} f(-z_j(\mathbf{k})) \frac{[z_j(\mathbf{k})]^3}{[z_j(\mathbf{k}) - z_1(\mathbf{k})] \dots [z_j(\mathbf{k}) - z_{j-1}(\mathbf{k})][z_j(\mathbf{k}) - z_{j+1}(\mathbf{k})] \dots [z_j(\mathbf{k}) - z_4(\mathbf{k})]} \quad 0 < \tau < \beta, \quad (\text{M.41})$$

$$G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = \sum_{j=1}^4 e^{-z_j(\mathbf{k})\tau} f(z_j(\mathbf{k})) \frac{[z_j(\mathbf{k})]^3}{[z_j(\mathbf{k}) - z_1(\mathbf{k})] \dots [z_j(\mathbf{k}) - z_{j-1}(\mathbf{k})][z_j(\mathbf{k}) - z_{j+1}(\mathbf{k})] \dots [z_j(\mathbf{k}) - z_4(\mathbf{k})]} \quad -\beta < \tau < 0, \quad (\text{M.42})$$

où les $z_j(\mathbf{k})$ sont les racines du polynôme

$$z^4 - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} z^3 - s_1 z^2 - s_2(\mathbf{k}) z - s_3(\mathbf{k}). \quad (\text{M.43})$$

Finalement on utilise

$$G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = \bar{G}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) + \left[G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) - \bar{G}_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) \right] \quad (\text{M.44})$$

où la fonction entre crochets est la contribution des fréquences plus grandes (en valeur absolue) que la fréquence de coupure.

Le calcul de (M.36) se fait en utilisant des splines cubique pour représenter la fonction $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)G^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau)$. D'après l'annexe J, on doit connaître la dérivée de cette fonction à $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ pour calculer le spline. Toutefois, cette fonction est symétrique par rapport à $\beta/2$, donc seule la dérivée à $\tau = 0$ est nécessaire. L'expression (M.44) se réécrit comme

$$G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = T \sum_{n=-\frac{N_T}{2}}^{\frac{N_T}{2}-1} e^{-ik_n \tau} \left[G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] + G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) \quad (\text{M.45})$$

et donc

$$\frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} = T \sum_{n=-\frac{N_T}{2}}^{\frac{N_T}{2}-1} (-ik_n) \left[G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] + \frac{\partial G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0}, \quad (\text{M.46})$$

$$\frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} = T \sum_{n=-\frac{N_T}{2}}^{\frac{N_T}{2}-1} (ik_n) \left[G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] + \frac{\partial G_{inf}^{(2)}(\mathbf{k}, -\tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} \quad (\text{M.47})$$

où le dernier terme de chaque expression est simplement la dérivée de (M.41) ou (M.42) (après avoir remplacé τ par $-\tau$ dans cette dernière), selon le cas, à $\tau = 0$.

Toujours à $\mathbf{q} = 0$, le second terme de (L.67) s'écrit

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_2 = & -\frac{U}{4} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1} \sum_{k_2} G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) \\ & \times \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) [3U_{sp} \chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch} \chi_{ch}(k_2 - k_1)] \end{aligned} \quad (\text{M.48})$$

où $k_1 + iq_n = (\mathbf{k}_1, ik_m + iq_n)$. Maintenant si on définit

$$\begin{aligned} f_n(k_2) &= \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) \\ V(k_2 - k_1) &= [3U_{sp} \chi_{sp}(k_2 - k_1) + U_{ch} \chi_{ch}(k_2 - k_1)] , \end{aligned} \quad (\text{M.49})$$

(M.48) devient

$$\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_2 = -\frac{U}{4} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) V(k_2 - k_1) . \quad (\text{M.50})$$

La somme sur k_2 étant une convolution on a

$$\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_2 = -\frac{U}{4} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \sum_{\bar{\mathbf{l}}} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{\mathbf{l}}} f_n(\bar{\mathbf{l}}) V(\bar{\mathbf{l}}) . \quad (\text{M.51})$$

Explicitement, la fonction $\sum_{\bar{\mathbf{l}}} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{\mathbf{l}}} f_n(\bar{\mathbf{l}}) V(\bar{\mathbf{l}})$ s'écrit

$$\sum_{\bar{\mathbf{l}}} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{\mathbf{l}}} f_n(\bar{\mathbf{l}}) V(\bar{\mathbf{l}}) = \sum_j \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{ik_m \tau} f_n(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) . \quad (\text{M.52})$$

La fonction $f_n(\mathbf{r}, \tau)$ est donnée par

$$f_n(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}) T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) . \quad (\text{M.53})$$

Puisque $G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m)$ est la fonction de Green sans interaction, la TF sur les fréquences se fait analytiquement. En utilisant (M.40) on obtient, pour $q_n \neq 0$,

$$\begin{aligned} T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\ = \frac{e^{iq_n \tau} - 1}{iq_n} e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau} [\theta(\tau)(1 - f(\tilde{\epsilon}_k)) - \theta(-\tau)f(\tilde{\epsilon}_k)] . \end{aligned} \quad (\text{M.54})$$

Maintenant, pour $q_n = 0$, on ne peut pas utiliser le théorème des résidus directement

puisque la fonction a un pôle double, on a plutôt

$$\begin{aligned}
T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m)^2 &= T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} \left(\frac{1}{ik_m - \tilde{\epsilon}_k} \right)^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial \tilde{\epsilon}_k} T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} \left(\frac{1}{ik_m - \tilde{\epsilon}_k} \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \left(-e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau} [(1 - f(\tilde{\epsilon}_k))\theta(\tau) - f(\tilde{\epsilon}_k)\theta(-\tau)] \right) \\
&= \tau e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau} [(1 - f(\tilde{\epsilon}_k))\theta(\tau) - f(\tilde{\epsilon}_k)\theta(-\tau)] \\
&\quad - e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau} \left[-\frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_k)}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \theta(\tau) - \frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_k)}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \theta(-\tau) \right] \\
T \sum_{ik_m} e^{-ik_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_m)^2 &= e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau} \left(\tau [(1 - f(\tilde{\epsilon}_k))\theta(\tau) - f(\tilde{\epsilon}_k)\theta(-\tau)] + \frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_k)}{\partial \tilde{\epsilon}_k} \right).
\end{aligned} \tag{M.55}$$

Pour $\tau > 0$ et $q_n \neq 0$, on a donc

$$\begin{aligned}
f_n(\mathbf{r}, \tau) &= \frac{e^{iq_n \tau} - 1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) f(-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} \\
&= \frac{e^{iq_n \tau} - 1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{(\beta - \tau)\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \\
&= g_n(\tau) h(\mathbf{r}, \tau).
\end{aligned} \tag{M.56}$$

Les fonctions $f_n(\mathbf{r}, \tau)$ pour différents n sont donc obtenues à partir de la même fonction

$$h(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{(\beta - \tau)\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \tag{M.57}$$

en multipliant par $g_n(\tau) = (e^{iq_n \tau} - 1)/(iq_n)$. On obtient

$$\begin{aligned}
\sum_{\bar{\mathbf{l}}} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{\mathbf{l}}} f_n(\bar{\mathbf{l}}) V(\bar{\mathbf{l}}) &= \int d\tau \sum_j e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{ik_m \tau} f_n(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \\
&= \int d\tau e^{ik_m \tau} g_n(\tau) \sum_j e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau)
\end{aligned} \tag{M.58}$$

et

$$\begin{aligned}
\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_2 &= -\frac{U}{4} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ik_m} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\
&\quad \times \int d\tau e^{ik_m \tau} g_n(\tau) \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \\
&= -\frac{U}{4} \frac{1}{iq_n} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ik_m} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \\
&\quad \times \int d\tau (e^{i(k_m + q_n)\tau} - e^{ik_m \tau}) \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \\
&= -\frac{U}{4} \frac{1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \quad (\text{M.59}) \\
&\quad \times \left(\int d\tau e^{i(k_m + q_n)\tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \right. \\
&\quad \left. - \int d\tau e^{ik_m \tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \right) \\
\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_2 &= -\frac{U}{4} \frac{1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) \left(T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) J(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) \right. \\
&\quad \left. - T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) J(\mathbf{k}, ik_m) \right),
\end{aligned}$$

avec

$$J(\mathbf{k}, ik_m) = G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) \int d\tau e^{ik_m \tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau). \quad (\text{M.60})$$

En utilisant

$$\begin{aligned}
T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) J(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{-iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) J(\mathbf{k}, -\tau) \\
T \sum_{ik_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m + iq_n) J(\mathbf{k}, ik_m) &= \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) J(\mathbf{k}, -\tau), \quad (\text{M.61})
\end{aligned}$$

on obtient finalement

$$\begin{aligned}
\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_2 &= -\frac{U}{4} \frac{1}{iq_n} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) \left(\int_0^\beta d\tau e^{-iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) J(\mathbf{k}, -\tau) \right. \\
&\quad \left. - \int_0^\beta d\tau e^{iq_n \tau} G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) J(\mathbf{k}, -\tau) \right). \quad (\text{M.62})
\end{aligned}$$

Pour faire la TF sur τ dans l'expression (M.60) en utilisant des spline cubiques, on doit calculer la dérivée par rapport à τ de $h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau)$ à $\tau = 0$ et $\tau = \beta$. On doit donc

connaître les dérivée par rapport à τ de $h(\mathbf{r}_j, \tau)$ et $V(\mathbf{r}_j, \tau)$. D'abord, d'après (M.57), on a

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} c_{\mathbf{k}} f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) e^{(\beta-\tau)\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{M.63})$$

et la dérivée par rapport à τ de $V(\mathbf{r}_j, \tau)$ à $\tau = 0$ a été donnée à l'équation (M.30). Puisque $V(\mathbf{r}_j, \tau)$ est symétrique par rapport à $\beta/2$ on a que

$$\left. \frac{\partial V(\mathbf{r}_j, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\beta} = - \left. \frac{\partial V(\mathbf{r}_j, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}, \quad (\text{M.64})$$

toujours en considérant que $0 < \tau < \beta$. On doit aussi calculer $J(\mathbf{k}, -\tau)$. Or, pour calculer

$$Q(\mathbf{k}, ik_n) = \int d\tau e^{ik_n \tau} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau) \quad (\text{M.65})$$

dans l'expression (M.60), on a utilisé la méthode de l'annexe J qui nous donne la forme

$$Q(\mathbf{k}, ik_n) \xrightarrow{ik_n \rightarrow \infty} \frac{q_1(\mathbf{k})}{ik_n} + \frac{q_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{q_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3}. \quad (\text{M.66})$$

En utilisant la forme asymptotique de $G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m)$ (M.39), on obtient

$$J_{inf}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \left(\frac{s_1}{ik_n} + \frac{s_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{s_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3} \right)} \left(\frac{q_1(\mathbf{k})}{ik_n} + \frac{q_2(\mathbf{k})}{(ik_n)^2} + \frac{q_3(\mathbf{k})}{(ik_n)^3} \right) \quad (\text{M.67})$$

dont la TF sur k_n est

$$J_{inf}(\mathbf{k}, -\tau) = \sum_{j=1}^4 e^{z_j(\mathbf{k})\tau} f(z_j(\mathbf{k})) \frac{q_1(\mathbf{k})[z_j(\mathbf{k})]^2 + q_2(\mathbf{k})z_j(\mathbf{k}) + q_3(\mathbf{k})}{\prod_{i \neq j} [z_j(\mathbf{k}) - z_i(\mathbf{k})]} \quad (\text{M.68})$$

où les $z_j(\mathbf{k})$ sont les racines du polynôme (M.43). La fonction $J(\mathbf{k}, -\tau)$ s'écrit alors

$$J(\mathbf{k}, -\tau) = T \sum'_{ik_n} e^{ik_n \tau} [J(\mathbf{k}, ik_n) - J_{inf}(\mathbf{k}, ik_n)] + J_{inf}(\mathbf{k}, -\tau) \quad (\text{M.69})$$

où \sum'_{ik_n} est une somme sur un nombre fini de fréquences.

Pour terminer, on doit aussi calculer la dérivée par rapport à τ à $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ de $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)J(\mathbf{k}, -\tau)$ pour pouvoir calculer le spline de cette fonction et faire les TF sur τ dans (M.62). On a déjà donné la dérivée de $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ à $\tau = 0$ à l'équation (M.46), à

$\tau = \beta$ on peut montrer, en utilisant la forme spectrale de $G(\mathbf{k}, \tau)$, que

$$\left. \frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\beta} = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \left. \frac{\partial G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}. \quad (\text{M.70})$$

Pour obtenir la dérivée de $J(\mathbf{k}, -\tau)$, il suffit de dériver l'expression (M.69).

Maintenant, pour $q_n = 0$ et $\tau > 0$, on a

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{r}, \tau) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) T \sum_{i\mathbf{k}_m} e^{-i\mathbf{k}_m \tau} G^{(1)}(\mathbf{k}, i\mathbf{k}_m)^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) e^{-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} \left(\tau(1 - f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})) + \frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})}{\partial \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) e^{-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tau} \left(\tau f(-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) + \frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})}{\partial \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right). \end{aligned} \quad (\text{M.71})$$

et

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(0, 0)_2 &= -\frac{U}{4} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) T \sum_{i\mathbf{k}_m} G^{(2)}(\mathbf{k}, i\mathbf{k}_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, i\mathbf{k}_m) \\ &\quad \times \int_0^\beta d\tau \sum_j e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k}_m \tau} f_0(\mathbf{r}_j, \tau) V(\mathbf{r}_j, \tau). \end{aligned} \quad (\text{M.72})$$

Le troisième terme de (L.67), à $\mathbf{q} = 0$ est

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 &= \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^3 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, q_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \\ &\quad \times G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1)] \\ &\quad \times \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \left[1 + \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(q_1 + iq_n) \right] \right. \\ &\quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \left[1 - \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(q_1 + iq_n) \right] \right) \end{aligned} \quad (\text{M.73})$$

ou encore

$$\begin{aligned}
 \chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 &= \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \\
 &\quad \times G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right. \\
 &\quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \\
 &\quad \times \frac{T}{N} \sum_{k_2} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_2) G^{(1)}(k_2) G^{(1)}(k_2 + iq_n) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1)]
 \end{aligned} \tag{M.74}$$

$$\begin{aligned}
 \chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 &= \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \\
 &\quad \times G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right. \\
 &\quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \\
 &\quad \times \frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1)]
 \end{aligned} \tag{M.75}$$

où $f_n(k_2)$ est défini par l'équation (M.49) et où on a utilisé

$$\begin{aligned}
 1 + \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(q) &= \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q)} \\
 1 - \frac{U_{ch}}{2} \chi_{ch}(q) &= \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q)}.
 \end{aligned} \tag{M.76}$$

La somme sur k_2 est une somme de deux convolutions et s'écrit

$$\begin{aligned}
\frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1)] \\
= \sum_{\bar{1}} (e^{i(q_1 + iq_n)\bar{1}} + e^{-iq_1\bar{1}}) f_n(\bar{1}) G^{(1)}(-\bar{1}) \\
= \sum_j \int_0^\beta d\tau (e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} e^{iq_m\tau}) f_n(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(-\mathbf{r}_j, -\tau) \\
= \int_0^\beta d\tau (-e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{iq_m\tau}) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} f_n(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau)
\end{aligned} \tag{M.77}$$

où $q_1 = (\mathbf{q}_1, iq_m)$ et on a utilisé le fait que $f_n(-\mathbf{r}_j, \tau) = -f_n(\mathbf{r}_j, \tau)$ et $G^{(1)}(-\mathbf{r}_j, -\tau) = G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau)$. Maintenant, en utilisant (M.56), on a, pour $q_n \neq 0$,

$$\begin{aligned}
\frac{T}{N} \sum_{k_2} f_n(k_2) [G^{(1)}(k_2 + q_1 + iq_n) + G^{(1)}(k_2 - q_1)] \\
= \int d\tau (-e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{iq_m\tau}) g_n(\tau) \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau) \\
= \frac{1}{iq_n} \int d\tau (-e^{-iq_m\tau} + e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{i(q_m + q_n)\tau} - e^{iq_m\tau}) \\
\times \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau). \tag{M.78}
\end{aligned}$$

Si on remplace cette expression dans (M.75), on obtient

$$\begin{aligned}
\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, q_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \\
\times G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right. \\
\left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \\
\times \int d\tau (-e^{-iq_m\tau} + e^{-i(q_m + q_n)\tau} + e^{i(q_m + q_n)\tau} - e^{iq_m\tau}) \\
\times \sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau). \tag{M.79}
\end{aligned}$$

En utilisant les définitions suivantes :

$$\begin{aligned}
 \bar{G}_n^{(1)}(k_1 + q_1) &= G^{(1)}(k_1 + q_1 + iq_n) \\
 H_n(q_1) &= \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q_1)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q_1 + iq_n)} \right. \\
 &\quad \left. + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q_1)} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(q_1 + iq_n)} \right) \\
 &\quad \times \int d\tau \left(e^{\imath(q_m + q_n)\tau} + e^{-\imath(q_m + q_n)\tau} - e^{\imath q_m \tau} - e^{-\imath q_m \tau} \right) \\
 &\quad \times \sum_j e^{-\imath \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau),
 \end{aligned} \tag{M.80}$$

(M.79) s'écrit

$$\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{k_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \frac{T}{N} \sum_{q_1} \bar{G}_n^{(1)}(k_1 + q_1) H_n(q_1). \tag{M.81}$$

ou encore

$$\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{k_1} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) G^{(2)}(k_1) G^{(2)}(k_1 + iq_n) \sum_{\bar{1}} e^{\imath k_1 \bar{1}} \bar{G}_n^{(1)}(-\bar{1}) H_n(\bar{1}). \tag{M.82}$$

Comme la somme sur $\bar{1}$ ne donne pas une fonction de $k_1 + iq_n$, on doit effectuer la somme sur k_1 pour chaque fréquence iq_n . De plus, on a

$$\bar{G}_n^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} T \sum_m e^{-\imath k_m \tau} \frac{1}{\imath k_m + iq_n - \tilde{\epsilon}_k}, \tag{M.83}$$

et d'après (M.40),

$$\begin{aligned}
 \bar{G}_n^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_j \text{Res} \left[\frac{1}{z + iq_n - \tilde{\epsilon}_k} \right] e^{-z_j \tau} [\theta(\tau) f(-z_j) - \theta(-\tau) f(z_j)] \\
 &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{(-\tilde{\epsilon}_k + iq_n)\tau} [\theta(\tau) f(-\tilde{\epsilon}_k + iq_n) - \theta(-\tau) f(\tilde{\epsilon}_k - iq_n)] \\
 &= -e^{\imath q_n \tau} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{\imath \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-\tilde{\epsilon}_k \tau} [\theta(\tau) f(-\tilde{\epsilon}_k) - \theta(-\tau) f(\tilde{\epsilon}_k)] \\
 \bar{G}_n^{(1)}(\mathbf{r}, \tau) &= e^{\imath q_n \tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, \tau).
 \end{aligned} \tag{M.84}$$

et donc

$$\chi_{J_x J_x}(0, iq_n)_3 = \frac{1}{iq_n} \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, iq_m} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_m) G^{(2)}(\mathbf{k}, iq_m + iq_n) \sum_{\mathbf{r}} \int d\tau e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i(k_m + q_n)\tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) H_n(\mathbf{r}, \tau). \quad (\text{M.85})$$

Pour calculer $H_n(\mathbf{r}, \tau)$ on fait la TF sur \mathbf{q} de

$$H_n(\mathbf{q}, \tau) = T \sum'_{iq_m} e^{-iq_m \tau} [H_n(\mathbf{q}, iq_m) - H_n^{inf}(\mathbf{q}, iq_m)] + H_n^{inf}(\mathbf{q}, \tau) \quad (\text{M.86})$$

où

$$H_n^{inf}(\mathbf{q}, iq_m) = \left(3U_{sp} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m)^2}} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m + iq_n)^2}} + U_{ch} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m)^2}} \frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m + iq_n)^2}} \right) \times 2hg(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{(iq_m + iq_n)^2} - \frac{1}{(iq_m)^2} \right) \quad (\text{M.87})$$

$$H_n^{inf}(\mathbf{q}, iq_m) = -2(iq_n)hg(\mathbf{q}) \left(3U_{sp} \frac{2iq_m + iq_n}{[(iq_m)^2 - \frac{U_{sp}}{2}c(\mathbf{q})][(iq_m + iq_n)^2 - \frac{U_{sp}}{2}c(\mathbf{q})]} + U_{ch} \frac{2iq_m + iq_n}{[(iq_m)^2 + \frac{U_{ch}}{2}c(\mathbf{q})][(iq_m + iq_n)^2 + \frac{U_{ch}}{2}c(\mathbf{q})]} \right). \quad (\text{M.88})$$

Rappelons que, d'après l'annexe J, $hg(\mathbf{q})$ est la différence des dérivées par rapport à τ de la fonction

$$\sum_j e^{-i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau) \quad (\text{M.89})$$

à $\tau = 0$ et $\tau = \beta$. Ces dérivées sont faciles à calculer puisqu'on connaît les expressions analytiques de $h(\mathbf{k}, \tau)$ et $G^{(1)}(\mathbf{k}, -\tau)$. Quant à $c(\mathbf{q})$, cette fonction est égale à deux fois la dérivée de $\chi_0(\mathbf{q}, \tau)$ à $\tau = 0$ (car $\chi_0(\mathbf{q}, \tau)$ est symétrique par rapport à $\beta/2$), qui est

aussi facile à évaluer à partir des dérivée de $G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)$. Maintenant, en utilisant

$$T \sum_{iq_n} e^{-iq_n \tau} g(iq_n) = \sum_j \text{Res}[g(z)] e^{-z_j \tau} n_B(-z_j), \quad (\text{M.90})$$

la TF sur q_m est

$$H_n^{inf}(\mathbf{q}, \tau) = -2(iq_n)hg(\mathbf{q}) \left(3U_{sp} \sum_j e^{-z_j^{sp}(\mathbf{q})\tau} n_B(-z_j^{sp}(\mathbf{q})) \frac{2z_j^{sp}(\mathbf{q}) + iq_n}{\prod_{i \neq j} [z_j^{sp}(\mathbf{q}) - z_i^{sp}(\mathbf{q})]} \right. \\ \left. + U_{ch} \sum_j e^{-z_j^{ch}(\mathbf{q})\tau} n_B(-z_j^{ch}(\mathbf{q})) \frac{2z_j^{ch}(\mathbf{q}) + iq_n}{\prod_{i \neq j} [z_j^{ch}(\mathbf{q}) - z_i^{ch}(\mathbf{q})]} \right) \quad (\text{M.91})$$

où les $z_j^{sp}(\mathbf{q})$ sont les racines de la fonction

$$\left[z^2 - \frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q}) \right] \left[(z + iq_n)^2 - \frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q}) \right], \quad (\text{M.92})$$

soit

$$z_0^{sp} = i\sqrt{-\frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})} \\ z_1^{sp} = -i\sqrt{-\frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})} \\ z_2^{sp} = -iq_n + i\sqrt{-\frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})} \\ z_3^{sp} = -iq_n - i\sqrt{-\frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})} \quad (\text{M.93})$$

où la racine est écrite explicitement comme étant imaginaire. En effet, $c(\mathbf{q})$ est négatif puisque $\chi_0(q)$ est toujours positif. Les $z_j^{ch}(\mathbf{q})$ sont les racines de

$$\left[z^2 + \frac{U_{ch}}{2} c(\mathbf{q}) \right] \left[(z + iq_n)^2 + \frac{U_{ch}}{2} c(\mathbf{q}) \right], \quad (\text{M.94})$$

soit

$$\begin{aligned}
 z_0^{ch} &= \sqrt{-\frac{U_{ch}}{2}c(\mathbf{q})} \\
 z_1^{ch} &= -\sqrt{-\frac{U_{ch}}{2}c(\mathbf{q})} \\
 z_2^{ch} &= -iq_n + \sqrt{-\frac{U_{ch}}{2}c(\mathbf{q})} \\
 z_3^{ch} &= -iq_n - \sqrt{-\frac{U_{ch}}{2}c(\mathbf{q})}.
 \end{aligned} \tag{M.95}$$

Notons que, d'après sa définition M.80, $H_n(\mathbf{q} = 0, iq_m) = 0$. En effet,

$$\sum_j h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau) = 0 \tag{M.96}$$

car $h(\mathbf{r}_j, \tau)$ est une fonction impaire en x alors que $G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau)$ est paire.

Il y a toutefois un désavantage à utiliser directement la transformé de Fourier de $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ défini dans (M.80) dans l'expression (M.85). En effet cette fonction a un maximum $q_m = -q_n$ qui provient du facteur

$$\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \tag{M.97}$$

dans le terme proportionnel à U_{sp} . La fonction $H_n(\mathbf{r}, \tau)$ a donc des oscillations en τ à la fréquence q_n , ce qui nécessite de plus en plus de points discret τ_j pour bien la représenter lorsque q_n augmente. De plus, comme la fonction $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ a aussi un maximum à $q_m = 0$ qui provient du facteur

$$\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}, \tag{M.98}$$

il ne suffit pas de faire une translation en fréquence avant de faire la TF pour éliminer les oscillations (on les obtient ensuite en multipliant la TF par $\exp(i\omega_0\tau)$ où ω_0 est la fréquence de translation). Au mieux, on pourrait alors réduire la fréquence des oscillations à $q_n/2$. On essaiera plutôt d'écrire cette fonction comme un somme de deux fonctions ayant chacune un seul maximum, ce qui nous permettra d'utiliser une translation pour

factoriser la partie oscillatoire si nécessaire. D'abord, on peut écrire

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} = \\ \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \\ + \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}. \end{aligned} \quad (\text{M.99})$$

D'autre part posons

$$D(\mathbf{q}, iq_m) = \int d\tau \left(e^{iq_m \tau} + e^{-iq_m \tau} \right) \sum_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} h(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau), \quad (\text{M.100})$$

la partie “spin” de $H_n(\mathbf{q}, iq_m)$ s'écrit

$$\begin{aligned} - \frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \\ + \frac{D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) - D(\mathbf{q}, iq_m)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}. \end{aligned} \quad (\text{M.101})$$

On remarque que, puisque $D(\mathbf{q}, iq_m)$ et $\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)$ sont des fonctions paires, la fonction

$$\frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \quad (\text{M.102})$$

est indéterminée lorsque $q_m = -q_n/2$, ce qui est possible lorsque n est pair. Toutefois, on sait, d'après (M.80), que $H_n(\mathbf{q}, -\frac{iq_n}{2})$ est nul, et donc cette indétermination ne pose pas de problème. Maintenant, on remarque que dans l'expression (M.101), le second terme est obtenu, à un signe près, en changeant iq_m pour $-iq_m - iq_n$ dans le premier. Donc si on pose

$$\begin{aligned} I_n(\mathbf{q}, iq_m) = 3U_{sp} \frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)} \\ + U_{ch} \frac{D(\mathbf{q}, iq_m) - D(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)}{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m) - \chi_0(\mathbf{q}, iq_m + iq_n)} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_m)}, \end{aligned} \quad (\text{M.103})$$

on obtient

$$H_n(\mathbf{q}, iq_m) = -I_n(\mathbf{q}, iq_m) + I_n(\mathbf{q}, -iq_m - iq_n). \quad (\text{M.104})$$

Maintenant, avec

$$I_n(\mathbf{q}, \tau) = T \sum_{iq_m} e^{-iq_m \tau} I_n(\mathbf{q}, iq_m), \quad (\text{M.105})$$

c'est-à-dire

$$I_n(\mathbf{q}, iq_m) = \int_0^\beta d\tau e^{iq_m \tau} I_n(\mathbf{q}, \tau), \quad (\text{M.106})$$

on a que

$$\begin{aligned} I_n(\mathbf{q}, -iq_m - iq_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{-i(q_m + q_n)\tau} I_n(\mathbf{q}, \tau) \\ &= - \int_0^{-\beta} d\tau e^{i(q_m + q_n)\tau} I_n(\mathbf{q}, -\tau) \\ &= \int_{-\beta}^0 d\tau e^{i(q_m + q_n)\tau} I_n(\mathbf{q}, -\tau) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i(q_m + q_n)(\tau - \beta)} I_n(\mathbf{q}, -\tau + \beta) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i(q_m + q_n)\tau} I_n(\mathbf{q}, -\tau) \end{aligned} \quad (\text{M.107})$$

et donc

$$T \sum_{iq_m} e^{-iq_m \tau} I_n(\mathbf{q}, -iq_m - iq_n) = e^{iq_n \tau} I_n(\mathbf{q}, -\tau). \quad (\text{M.108})$$

Enfin, on obtient

$$H_n(\mathbf{q}, \tau) = T \sum_{iq_m} e^{-iq_m \tau} H_n(\mathbf{q}, iq_m) = -I_n(\mathbf{q}, \tau) + e^{iq_n \tau} I_n(\mathbf{q}, -\tau). \quad (\text{M.109})$$

Si on revient à l'expression (M.82), la somme sur $\bar{\mathbf{l}}$ s'écrit

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{\mathbf{l}}} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \bar{\mathbf{l}}} \bar{G}_n^{(1)}(-\bar{\mathbf{l}}) H_n(\bar{\mathbf{l}}) &= \\ &= \sum_{\mathbf{r}} \int d\tau e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i(k_m + q_n)\tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) [-I_n(\mathbf{r}, \tau) + e^{iq_n \tau} I_n(\mathbf{r}, -\tau)] \\ &= \sum_{\mathbf{r}} \int d\tau e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-ik_m \tau} [-e^{-iq_n \tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) I_n(\mathbf{r}, \tau) + G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) I_n(\mathbf{r}, -\tau)] \end{aligned} \quad (\text{M.110})$$

Maintenant, si on revient à (M.77), mais pour $q_n = 0$, avec

$$f_0(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) e^{-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}\tau} \left(\tau f(-\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}) + \frac{\partial f(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})}{\partial \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right), \quad (\text{M.111})$$

on remplace la somme sur k_2 dans (M.75) par

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{1}} (e^{i q_1 \bar{1}} + e^{-i q_1 \bar{1}}) f_0(\bar{1}) G^{(1)}(-\bar{1}) \\ = \int d\tau (-e^{-i q_m \tau} + e^{i q_m \tau}) \sum_j e^{-i q_1 \mathbf{r}_j} f_0(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau) \end{aligned} \quad (\text{M.112})$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(0, 0)_3 = \frac{U}{2} \left(\frac{T}{N} \right)^2 \sum_{k_1, q_1} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}_1) [G^{(2)}(k_1)]^2 \\ \times G^{(1)}(k_1 + q_1) \left(3U_{sp} \left[\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \right]^2 + U_{ch} \left[\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \right]^2 \right) \\ \int d\tau (-e^{-i q_m \tau} + e^{i q_m \tau}) \sum_j e^{-i q_1 \mathbf{r}_j} f_0(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau). \end{aligned} \quad (\text{M.113})$$

et avec

$$\begin{aligned} H_0(q_1) = \left(3U_{sp} \left[\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(q_1)} \right]^2 + U_{ch} \left[\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(q_1)} \right]^2 \right) \\ \times \int d\tau (-e^{-i q_m \tau} + e^{i q_m \tau}) \sum_j e^{-i q_1 \mathbf{r}_j} f_0(\mathbf{r}_j, \tau) G^{(1)}(\mathbf{r}_j, -\tau). \end{aligned} \quad (\text{M.114})$$

on obtient

$$\begin{aligned} \chi_{J_x J_x}(0, 0)_3 = \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) [G^{(2)}(k)]^2 \frac{T}{N} \sum_q G^{(1)}(k + q) H_0(q) \\ = \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) [G^{(2)}(k)]^2 \sum_{\bar{1}} e^{i\mathbf{k}\cdot\bar{1}} G^{(1)}(-\bar{1}) H_0(\bar{1}) \\ = \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, i k_n} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}(\mathbf{k}) [G^{(2)}(\mathbf{k}, i k_n)]^2 \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int d\tau e^{-i k_n \tau} G^{(1)}(\mathbf{r}, -\tau) H_0(\mathbf{r}, \tau). \end{aligned} \quad (\text{M.115})$$

Pour calculer $H_0(\mathbf{r}, \tau)$ on utilise encore M.86 avec $n = 0$ et

$$H_0^{inf}(\mathbf{q}, iq_m) = \left(3U_{sp} \left[\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m)^2}} \right]^2 + U_{ch} \left[\frac{1}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \frac{c(\mathbf{q})}{(iq_m)^2}} \right]^2 \right) \times 2 \left(\frac{fg_1(\mathbf{q})}{iq_m} + \frac{fg_3(\mathbf{q})}{(iq_m)^3} \right). \quad (\text{M.116})$$

$$H_0^{inf}(\mathbf{q}, iq_m) = 2 \left(3U_{sp} \frac{(iq_m)^3 fg_1(\mathbf{q}) + iq_m fg_3(\mathbf{q})}{[(iq_m)^2 - \frac{U_{sp}}{2} c(\mathbf{q})]^2} + U_{ch} \frac{(iq_m)^3 fg_1(\mathbf{q}) + iq_m fg_3(\mathbf{q})}{[(iq_m)^2 + \frac{U_{ch}}{2} c(\mathbf{q})]^2} \right). \quad (\text{M.117})$$

Pour obtenir la TF sur q_m de cette fonction on doit utiliser le théorème des résidus. On a que

$$\oint dz \frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 fg_1 + z fg_3}{(z - C)^2 (z + C)^2} = 0$$

$$= -T \sum_{iq_n} e^{-iq_n \tau} \frac{(iq_n)^3 fg_1 + iq_n fg_3}{(iq_n - C)^2 (iq_n + C)^2}$$

$$+ \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 fg_1 + z fg_3}{(z + C)^2} \right) \Big|_{z=C}$$

$$+ \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 fg_1 + z fg_3}{(z - C)^2} \right) \Big|_{z=-C}, \quad (\text{M.118})$$

où on a utilisé la formule générale du résidu d'une fonction à un pôle z_0 d'ordre n :

$$Res_{z=z_0} [g(z)] = \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{1}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} [(z - z_0)^n g(z)]. \quad (\text{M.119})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} \right) &= \frac{-\tau e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} + e^{-z\tau} \frac{\beta e^{-\beta z}}{(e^{-\beta z} - 1)^2} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} \\ &\quad + \frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{d}{dz} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} \end{aligned} \quad (\text{M.120})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} &= \frac{3z^2 f g_1 + f g_3}{(z + C)^2} - 2 \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^3} \\ &= \frac{3z^2 f g_1(z + C) + f g_3(z + C) - 2z^3 f g_1 - 2z f g_3}{(z + C)^3} \end{aligned} \quad (\text{M.121})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dz} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} \right|_{z=C} &= \frac{6C^3 f g_1 + 2C f g_3 - 2C^3 f g_1 - 2C f g_3}{8C^3} \\ &= \frac{f g_1}{2} \end{aligned} \quad (\text{M.122})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z + C)^2} \right) \right|_{z=C} &= \frac{-\tau e^{-C\tau}}{e^{-\beta C} - 1} \frac{C^3 f g_1 + C f g_3}{4C^2} + e^{-C\tau} \frac{\beta e^{-\beta C}}{(e^{-\beta C} - 1)^2} \frac{C^3 f g_1 + C f g_3}{4C^2} \\ &\quad + \frac{e^{-C\tau}}{e^{-\beta C} - 1} \frac{f g_1}{2} \\ &= \frac{\tau e^{(\beta-\tau)C}}{e^{\beta C} - 1} \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} + e^{-C\tau} \frac{\beta e^{\beta C}}{(e^{\beta C} - 1)^2} \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} \\ &\quad - \frac{e^{(\beta-\tau)C}}{e^{\beta C} - 1} \frac{f g_1}{2} \end{aligned} \quad (\text{M.123})$$

D'autre part,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} \right) &= \frac{-\tau e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} + e^{-z\tau} \frac{\beta e^{-\beta z}}{(e^{-\beta z} - 1)^2} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} \\ &\quad + \frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{d}{dz} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} \end{aligned} \quad (\text{M.124})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} &= \frac{3z^2 f g_1 + f g_3}{(z - C)^2} - 2 \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^3} \\ &= \frac{3z^2 f g_1(z - C) + f g_3(z - C) - 2z^3 f g_1 - 2z f g_3}{(z - C)^3} \end{aligned} \quad (\text{M.125})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dz} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} \right|_{z=-C} &= \frac{-6C^3 f g_1 - 2C f g_3 + 2C^3 f g_1 + 2C f g_3}{-8C^3} \\ &= \frac{f g_1}{2} \end{aligned} \quad (\text{M.126})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dz} \left(\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} - 1} \frac{z^3 f g_1 + z f g_3}{(z - C)^2} \right) \right|_{z=-C} &= \frac{-\tau e^{C\tau}}{e^{\beta C} - 1} \frac{-C^3 f g_1 - C f g_3}{4C^2} + e^{C\tau} \frac{\beta e^{\beta C}}{(e^{\beta C} - 1)^2} \frac{-C^3 f g_1 - C f g_3}{4C^2} \\ &\quad + \frac{e^{C\tau}}{e^{\beta C} - 1} \frac{f g_1}{2} \\ &= \frac{\tau e^{C\tau}}{e^{\beta C} - 1} \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} - e^{C\tau} \frac{\beta e^{\beta C}}{(e^{\beta C} - 1)^2} \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} \\ &\quad + \frac{e^{C\tau}}{e^{\beta C} - 1} \frac{f g_1}{2}. \end{aligned} \quad (\text{M.127})$$

De (M.118), (M.123) et (M.127), on obtient

$$\begin{aligned} T \sum_{iq_n} e^{-iq_n \tau} \frac{(iq_n)^3 f g_1 + iq_n f g_3}{(iq_n - C)^2 (iq_n + C)^2} &= \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} \frac{\tau}{e^{\beta C} - 1} (e^{C\tau} + e^{(\beta - \tau)C}) \\ &\quad + \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} \frac{\beta e^{\beta C}}{(e^{\beta C} - 1)^2} (e^{-C\tau} - e^{C\tau}) \\ &\quad + \frac{f g_1}{2} \frac{1}{e^{\beta C} - 1} (e^{C\tau} - e^{(\beta - \tau)C}) \\ T \sum_{iq_n} e^{-iq_n \tau} \frac{(iq_n)^3 f g_1 + iq_n f g_3}{(iq_n - C)^2 (iq_n + C)^2} &= \frac{C^2 f g_1 + f g_3}{4C} \left[\frac{\tau}{e^{\beta C} - 1} (e^{C\tau} + e^{(\beta - \tau)C}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\beta e^{\beta C}}{(e^{\beta C} - 1)^2} (e^{-C\tau} - e^{C\tau}) \right] \\ &\quad + \frac{f g_1}{2} \frac{1}{e^{\beta C} - 1} (e^{C\tau} - e^{(\beta - \tau)C}). \end{aligned} \quad (\text{M.128})$$

et en utilisant ce résultat, on obtient finalement

$$\begin{aligned}
H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau) = & 6U_{sp} \left[\frac{z_0^{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_0^{sp}(\mathbf{q})} \left(\frac{\tau}{e^{\beta z_0^{sp}(\mathbf{q})} - 1} \left[e^{z_0^{sp}(\mathbf{q})\tau} + e^{(\beta-\tau)z_0^{sp}(\mathbf{q})} \right] \right. \right. \\
& + \frac{\beta e^{\beta z_0^{sp}(\mathbf{q})}}{(e^{\beta z_0^{sp}(\mathbf{q})} - 1)^2} \left[e^{-z_0^{sp}(\mathbf{q})\tau} - e^{z_0^{sp}(\mathbf{q})\tau} \right] \Bigg) \\
& + \frac{f g_1}{2} \frac{1}{e^{\beta z_0^{sp}(\mathbf{q})} - 1} \left(e^{z_0^{sp}(\mathbf{q})\tau} - e^{(\beta-\tau)z_0^{sp}(\mathbf{q})} \right) \Bigg] \\
& + 2U_{ch} \left[\frac{z_0^{ch}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_0^{ch}(\mathbf{q})} \left(\frac{\tau}{e^{\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})} - 1} \left[e^{z_0^{ch}(\mathbf{q})\tau} + e^{(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} \right] \right. \right. \\
& + \frac{\beta e^{\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{(e^{\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})} - 1)^2} \left[e^{-z_0^{ch}(\mathbf{q})\tau} - e^{z_0^{ch}(\mathbf{q})\tau} \right] \Bigg) \\
& + \frac{f g_1}{2} \frac{1}{e^{\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})} - 1} \left(e^{z_0^{ch}(\mathbf{q})\tau} - e^{(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} \right) \Bigg].
\end{aligned} \tag{M.129}$$

La partie “spin” entre crochets de cette expression se réécrit comme

$$\begin{aligned}
& \frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4iz_{sp}(\mathbf{q})} \left(\frac{\tau}{e^{i\frac{\beta}{2}z_{sp}(\mathbf{q})} - e^{-i\frac{\beta}{2}z_{sp}(\mathbf{q})}} \left[e^{-i(\frac{\beta}{2}-\tau)z_{sp}(\mathbf{q})} + e^{i(\frac{\beta}{2}-\tau)z_{sp}(\mathbf{q})} \right] \right. \\
& + \frac{\beta}{\left(e^{i\frac{\beta}{2}z_{sp}(\mathbf{q})} - e^{-i\frac{\beta}{2}z_{sp}(\mathbf{q})} \right)^2} \left[e^{-iz_{sp}(\mathbf{q})\tau} - e^{iz_{sp}(\mathbf{q})\tau} \right] \Bigg) \\
& + \frac{f g_1}{2} \frac{1}{e^{i\frac{\beta}{2}z_{sp}(\mathbf{q})} - e^{-i\frac{\beta}{2}z_{sp}(\mathbf{q})}} \left(e^{-i(\frac{\beta}{2}-\tau)z_{sp}(\mathbf{q})} - e^{i(\frac{\beta}{2}-\tau)z_{sp}(\mathbf{q})} \right) \\
& = \frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4iz_{sp}(\mathbf{q})} \left(\tau \frac{\cos \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{i \sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} + \beta \frac{i \sin [z_{sp}(\mathbf{q})\tau]}{2 \sin^2 \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \right) \\
& \quad - \frac{f g_1}{2} \frac{\sin \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \\
& = \frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_{sp}(\mathbf{q})} \left(-\tau \frac{\cos \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} + \beta \frac{\sin [z_{sp}(\mathbf{q})\tau]}{2 \sin^2 \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \right) \\
& \quad - \frac{f g_1}{2} \frac{\sin \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}
\end{aligned} \tag{M.130}$$

où $iz_{sp}(\mathbf{q}) = z_0^{sp}(\mathbf{q})$. L'expression (M.131) devient donc

$$\begin{aligned}
 H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau) = & 6U_{sp} \left[\frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_{sp}(\mathbf{q})} \left(-\tau \frac{\cos \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} + \beta \frac{\sin [z_{sp}(\mathbf{q}) \tau]}{2 \sin^2 \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{f g_1}{2} \frac{\sin \left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau \right) z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \right] \\
 & + 2U_{ch} \left[\frac{z_0^{ch}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_0^{ch}(\mathbf{q})} \left(\tau \frac{e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} + e^{-\tau z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \beta \frac{e^{-(\beta+\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} - e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{(1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})})^2} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{f g_1}{2} \frac{e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} - e^{-\tau z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right],
 \end{aligned}
 \tag{M.131}$$

où la partie “charge” a été réécrite de façon que les arguments des exponentielles soit négatifs, une forme plus pratique numériquement. En effet, lorsque les exponentielles dépassent le nombre maximal permis par la précision numérique utilisée, la machine produit une indétermination. Avec la forme (M.131), on voit clairement que les termes s’annulent lorsque le module des arguments grandit.

Maintenant, pour faire la TF dans le temps de $G(-\mathbf{r}, -\tau)H_0(\mathbf{r}, \tau)$ dans (M.113), il faut calculer la dérivée par rapport à τ de $H_0(\mathbf{r}, \tau)$ à $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ de $H_0(\mathbf{r}, \tau)$. Pour ce faire, on utilise la même approche que pour le calcul de la dérivée par rapport à τ de $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau)$ à l’équation (M.46). On doit donc calculer la dérivée de $H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau)$ et ensuite

faire la TF dans l'espace de cette fonction. On a

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} = & 6U_{sp} \left[\frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_{sp}(\mathbf{q})} \left(-\frac{\cos\left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau\right) z_{sp}(\mathbf{q})\right]}{\sin\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} \right. \right. \\
& \left. \left. - \tau z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{\sin\left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau\right) z_{sp}(\mathbf{q})\right]}{\sin\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} + \beta z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{\cos[z_{sp}(\mathbf{q})\tau]}{2 \sin^2\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} \right) \right. \\
& \left. + z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{f g_1}{2} \frac{\cos\left[\left(\frac{\beta}{2} - \tau\right) z_{sp}(\mathbf{q})\right]}{\sin\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} \right] \\
& + 2U_{ch} \left[\frac{z_0^{ch}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_0^{ch}(\mathbf{q})} \left(\frac{e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} + e^{-\tau z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right. \right. \\
& \left. \left. + \tau z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} - e^{-\tau z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right. \right. \\
& \left. \left. - \beta z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{e^{-(\beta+\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} + e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{(1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})})^2} \right) \right. \\
& \left. + z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{f g_1}{2} \frac{e^{-(\beta-\tau)z_0^{ch}(\mathbf{q})} + e^{-\tau z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right], \tag{M.132}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0} = & 6U_{sp} \left[\frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_{sp}(\mathbf{q})} \left(-\frac{\cos\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]}{\sin\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} \right. \right. \\
& \left. \left. + \beta z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{1}{2 \sin^2\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} \right) \right. \\
& \left. + z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{f g_1}{2} \frac{\cos\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]}{\sin\left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q})\right]} \right] \\
& + 2U_{ch} \left[\frac{z_0^{ch}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_0^{ch}(\mathbf{q})} \left(\frac{e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})} + 1}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right. \right. \\
& \left. \left. - 2\beta z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{(1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})})^2} \right) \right. \\
& \left. + z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{f g_1}{2} \frac{e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})} + 1}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right], \tag{M.133}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\beta} &= 6U_{sp} \left[\frac{-z_{sp}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_{sp}(\mathbf{q})} \left(-\frac{\cos \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} + \beta z_{sp}(\mathbf{q}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \beta z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{\cos [\beta z_{sp}(\mathbf{q})]}{2 \sin^2 \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \right) \right. \\
&\quad \left. + z_{sp}(\mathbf{q}) \frac{f g_1}{2} \frac{\cos \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]}{\sin \left[\frac{\beta}{2} z_{sp}(\mathbf{q}) \right]} \right] \\
&+ 2U_{ch} \left[\frac{z_0^{ch}(\mathbf{q})^2 f g_1 + f g_3}{4z_0^{ch}(\mathbf{q})} \left(\frac{1 + e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} + \beta z_0^{ch}(\mathbf{q}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \beta z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{e^{-2\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})} + 1}{(1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})})^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + z_0^{ch}(\mathbf{q}) \frac{f g_1}{2} \frac{1 + e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}}{1 - e^{-\beta z_0^{ch}(\mathbf{q})}} \right] \\
&= \left. \frac{\partial H_0^{inf}(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}, \tag{M.134}
\end{aligned}$$

Notons que si le système possède des symétries miroir, les TF dans l'espace (réel ou réciproque) deviennent des transformées de Fourier en *cosinus* ou en *sinus* dans les dimensions possédant cette symétrie. On divise alors par deux pour chacune de ces dimensions la mémoire nécessaire et le temps de calcul. Pour ce qui est du temps, les fonctions de Green ne possèdent pas la symétrie d'inversion, mais c'est le cas par contre des susceptibilités en fréquence de Matsubara (ou en temps imaginaire). Les TF dans le temps de susceptibilités deviennent donc aussi des TF en *cosinus* ou en *sinus* et on divise encore par deux la mémoire et le temps de calcul. Ainsi, la fonction $V(\mathbf{r}_j, \tau_l)$ est donnée par la TF en *cosinus* dans l'espace et dans le temps de $V(\mathbf{q}, iq_n)$.

Typiquement dans nos calculs, on devra obtenir la conductivité sur une plage de plusieurs milliers de fréquences de Matsubara afin d'obtenir une précision raisonnable pour les températures qui nous intéressent, soit environ $T \geq 0.01$. Or en faisant quelques tests on note que le calcul de (M.82) par ordinateur dure environ 10 minutes pour chaque fréquences pour un réseau 128×128 et 16384 fréquences de Matsubara dans les sommes. Si on voulait calculer (M.82) pour 16384 fréquences on en aurait pour 100 jours environ, ce qui n'est pas réaliste. On calculera donc (M.82) pour un nombre de fréquences de l'ordre de quelques dizaines ou centaines soigneusement choisis qui pourront être calculées dans un temps de quelques heures à quelques journées.

Annexe N

Vertex irréductible de charge cohérent avec l'*ansatz* TPSC

Réécrivons l'équation (L.16) :

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{\sigma}^{(1)}(1, 2) &= U g_{\uparrow\downarrow}(1) \langle n_{-\sigma}(1) \rangle \delta(1^- - 2) \\
 &= U \frac{\langle n_{\sigma}(1) n_{-\sigma}(1) \rangle}{\langle n_{\sigma}(1) \rangle \langle n_{-\sigma}(1) \rangle} \langle n_{-\sigma}(1) \rangle \delta(1^- - 2) \\
 &= U \frac{\langle n_{\sigma}(1) n_{-\sigma}(1) \rangle}{\langle n_{\sigma}(1) \rangle} \delta(1^- - 2)
 \end{aligned} \tag{N.1}$$

Le vertex irréductible de charge est

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) &= \frac{\delta \Sigma_{\uparrow}(1, 2)}{\delta G_{\uparrow}(3, 4)} + \frac{\delta \Sigma_{\uparrow}(1, 2)}{\delta G_{\downarrow}(3, 4)} \\
 &= -U \frac{\langle n_{\sigma}(1) n_{-\sigma}(1) \rangle}{\langle n_{\sigma}(1) \rangle^2} \delta(1 - 3) \delta(1^+ - 4) \delta(1^- - 2) \\
 &\quad + \frac{U}{\langle n_{\sigma}(1) \rangle} \delta(1^- - 2) \left(\frac{\delta \langle n_{\sigma}(1) n_{-\sigma}(1) \rangle}{\delta G_{\uparrow}(3, 4)} + \frac{\delta \langle n_{\sigma}(1) n_{-\sigma}(1) \rangle}{\delta G_{\downarrow}(3, 4)} \right)
 \end{aligned} \tag{N.2}$$

Or on a

$$\begin{aligned}
 \chi_{sp}(1, 1) &= \langle S_z(1)^2 \rangle = \langle (n_{\uparrow}(1) - n_{\downarrow}(1))^2 \rangle \\
 &= \langle n_{\uparrow}(1)^2 \rangle + \langle n_{\downarrow}(1)^2 \rangle - \langle n_{\uparrow}(1) n_{\downarrow}(1) \rangle - \langle n_{\downarrow}(1) n_{\uparrow}(1) \rangle \\
 &= \langle n_{\uparrow}(1) \rangle + \langle n_{\downarrow}(1) \rangle - 2 \langle n_{\uparrow}(1) n_{\downarrow}(1) \rangle
 \end{aligned} \tag{N.3}$$

et donc

$$\langle n_{\uparrow}(1)n_{\downarrow}(1) \rangle = \frac{1}{2} (\langle n_{\uparrow}(1) \rangle + \langle n_{\downarrow}(1) \rangle - \chi_{sp}(1, 1)) . \quad (\text{N.4})$$

En remplaçant dans (N.2), on obtient

$$\begin{aligned} \Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) = & -U \frac{\langle n_{\sigma}(1)n_{-\sigma}(1) \rangle}{\langle n_{\sigma}(1) \rangle^2} \delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta(1^--2) \\ & + \frac{U}{\langle n_{\sigma}(1) \rangle} \delta(1^--2)\delta(1-3)\delta(1^+-4) \\ & - \frac{U}{2\langle n_{\sigma}(1) \rangle} \delta(1^--2) \left(\frac{\delta\chi_{sp}(1, 1)}{\delta G_{\uparrow}(3, 4)} + \frac{\delta\chi_{sp}(1, 1)}{\delta G_{\downarrow}(3, 4)} \right) . \end{aligned} \quad (\text{N.5})$$

De l'équation de Bethe-Salpeter (G.7) et de la définition du vertex irréductible de spin (L.18) on a

$$\chi_{sp}(1, 2) = -G_{\bar{\sigma}}(1, 2^+)G_{\bar{\sigma}}(2, 1^+) - \frac{1}{2}U_{sp}(\bar{2})G_{\bar{\sigma}}(1, \bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2}, 1^+)\chi_{sp}(\bar{2}, 2) \quad (\text{N.6})$$

où $\chi_{sp}(1, 2) \equiv \chi_{sp}(1, 1^+; 2^+, 2)$ et la barre de $\bar{\sigma}$ signifie une somme sur l'indice de spin. Maintenant, en appliquant la dérivée fonctionnelle par rapport à G_{σ} on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{sp}(1, 2)}{\delta G_{\sigma}(3, 4)} = & -\delta(1-3)\delta(2^+-4)G_{\sigma}(2, 1^+) - \delta(2-3)\delta(1^+-4)G_{\sigma}(1, 2^+) \\ & - \frac{1}{2}U_{sp}(\bar{2}) \left[\delta(1-3)\delta(\bar{2}^+-4)G_{\sigma}(\bar{2}, 1^+) \right. \\ & \quad \left. + \delta(\bar{2}-3)\delta(1^+-4)G_{\sigma}(1, \bar{2}^+) \right] \chi_{sp}(\bar{2}, 2) \\ & - \frac{1}{2} \frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma}(3, 4)} G_{\bar{\sigma}}(1, \bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2}, 1^+) \chi_{sp}(\bar{2}, 2) \\ & - \frac{1}{2}U_{sp}(\bar{2})G_{\bar{\sigma}}(1, \bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2}, 1^+) \frac{\delta\chi_{sp}(\bar{2}, 2)}{\delta G_{\sigma}(3, 4)} \end{aligned} \quad (\text{N.7})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,2)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -\delta(1-3)\delta(2^+-4)G_\sigma(2,1^+) - \delta(2-3)\delta(1^+-4)G_\sigma(1,2^+) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(4^-)\delta(1-3)G_\sigma(4^-,1^+)\chi_{sp}(4,2) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(3)\delta(1^+-4)G_\sigma(1,3^+)\chi_{sp}(3,2) \\
& - \frac{1}{2}\frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}G_{\bar{\sigma}}(1,\bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2},1^+)\chi_{sp}(\bar{2},2) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(\bar{2})G_{\bar{\sigma}}(1,\bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2},1^+)\frac{\delta\chi_{sp}(\bar{2},2)}{\delta G_\sigma(3,4)}
\end{aligned} \tag{N.8}$$

Cette équation a la forme de (H.3) (avec $C = -U_{sp}$), donc d'après (H.7), la solution est

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,2)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,\bar{1}) \left[-\delta(\bar{1}-3)\delta(2^+-4)G_\sigma(2,\bar{1}^+) \right. \\
& - \delta(2-3)\delta(\bar{1}^+-4)G_\sigma(\bar{1},2^+) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(4^-)\delta(\bar{1}-3)G_\sigma(4^-, \bar{1}^+)\chi_{sp}(4,2) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(3)\delta(\bar{1}^+-4)G_\sigma(\bar{1},3^+)\chi_{sp}(3,2) \\
& \left. - \frac{1}{2}\frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}G_{\bar{\sigma}}(\bar{1},\bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2},\bar{1}^+)\chi_{sp}(\bar{2},2) \right].
\end{aligned} \tag{N.9}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,2)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -\delta(2^+-4)\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,3)G_\sigma(2,3^+) \\
& - \delta(2-3)\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,4^-)G_\sigma(4^-,2^+) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(4^-)G_\sigma(4^-,3^+)\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,3)\chi_{sp}(4,2) \\
& - \frac{1}{2}U_{sp}(3)G_\sigma(4^-,3^+)\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,4^-)\chi_{sp}(3,2) \\
& - \frac{1}{2}\frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,\bar{1})G_{\bar{\sigma}}(\bar{1},\bar{2}^+)G_{\bar{\sigma}}(\bar{2},\bar{1}^+)\chi_{sp}(\bar{2},2).
\end{aligned} \tag{N.10}$$

or, avec $G_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{2}^+)G_{\sigma}(\bar{2}, \bar{1}^+) = -\chi_0(\bar{1}, \bar{2})$ et

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1 - \bar{1})\chi_0(\bar{1} - \bar{2}) &= \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}[(1 - \bar{2}) - \bar{3}]\chi_0(\bar{3}) \\ &= \frac{T}{N} \sum_q e^{iq(1-\bar{2})} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q)} \chi_0(q) \\ &= \chi_{sp}(1, \bar{2}), \end{aligned} \quad (\text{N.11})$$

on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{sp}(1, 2)}{\delta G_{\sigma}(3, 4)} &= -\delta(2^+ - 4) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1, 3)G_{\sigma}(2, 3^+) \\ &\quad - \delta(2 - 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1, 4^-)G_{\sigma}(4^-, 2^+) \\ &\quad - \frac{1}{2}U_{sp}(4^-)G_{\sigma}(4^-, 3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1, 3)\chi_{sp}(4, 2) \\ &\quad - \frac{1}{2}U_{sp}(3)G_{\sigma}(4^-, 3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1, 4^-)\chi_{sp}(3, 2) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_{\sigma}(3, 4)} \chi_{sp}(1, \bar{2}) \chi_{sp}(\bar{2}, 2). \end{aligned} \quad (\text{N.12})$$

Maintenant on a

$$\begin{aligned}
\frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)} &= U \frac{\delta}{\delta G_\sigma(3,4)} \frac{\langle n_\sigma(\bar{2}) n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \\
&= -U \frac{\langle n_\sigma(\bar{2}) n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle^2 \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \delta(\bar{2}-3) \delta(\bar{2}^+-4) \\
&\quad + U \frac{1}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \frac{\delta}{\delta G_\sigma(3,4)} \langle n_\sigma(\bar{2}) n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle \\
&= -U \frac{\langle n_\sigma(\bar{2}) n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle^2 \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \delta(\bar{2}-3) \delta(\bar{2}^+-4) \\
&\quad + \frac{U}{2} \frac{1}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \frac{\delta}{\delta G_\sigma(3,4)} (\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle + \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle - \chi_{sp}(\bar{2}, \bar{2})) \\
&= -U \frac{\langle n_\sigma(\bar{2}) n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle^2 \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \delta(\bar{2}-3) \delta(\bar{2}^+-4) \\
&\quad + \frac{U}{2} \frac{1}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \delta(\bar{2}-3) \delta(\bar{2}^+-4) \\
&\quad - \frac{U}{2} \frac{1}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \frac{\delta \chi_{sp}(\bar{2}, \bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)} \\
&= \left(\frac{U}{2} \frac{1}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} - U \frac{\langle n_\sigma(\bar{2}) n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle^2 \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \right) \delta(\bar{2}-3) \delta(\bar{2}^+-4) \\
&\quad - \frac{U}{2} \frac{1}{\langle n_\sigma(\bar{2}) \rangle \langle n_{-\sigma}(\bar{2}) \rangle} \frac{\delta \chi_{sp}(\bar{2}, \bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}, \tag{N.13}
\end{aligned}$$

et en utilisant l'invariance sous translation et $n_\sigma = n/2$,

$$\frac{\delta U_{sp}(\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)} = \left(\frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right) \delta(\bar{2}-3) \delta(\bar{2}^+-4) - \frac{2U}{n^2} \frac{\delta \chi_{sp}(\bar{2}, \bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}, \tag{N.14}$$

À partir d'ici, on supposera l'invariance sous translation donc les fonctions qui dépendent d'un seul indice deviennent des constantes. En substituant (N.14) dans (N.12) on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,2)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -\delta(2^+ - 4) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,3)G_\sigma(2,3^+) \\
& - \delta(2 - 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,4^-)G_\sigma(4^-,2^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,3)\chi_{sp}(4,2) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,4^-)\chi_{sp}(3,2) \\
& + \frac{1}{2}\chi_{sp}(1,\bar{2})\chi_{sp}(\bar{2},2) \left[\left(\frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right) \delta(\bar{2} - 3)\delta(\bar{2}^+ - 4) \right. \\
& \left. - \frac{2U}{n^2} \frac{\delta\chi_{sp}(\bar{2},\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)} \right].
\end{aligned} \tag{N.15}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,2)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -\delta(2^+ - 4) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,3)G_\sigma(2,3^+) \\
& - \delta(2 - 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,4^-)G_\sigma(4^-,2^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,3)\chi_{sp}(4,2) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0} (1,4^-)\chi_{sp}(3,2) \\
& + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4)\chi_{sp}(1,3)\chi_{sp}(3,2) \\
& - \frac{U}{n^2}\chi_{sp}(1,\bar{2})\chi_{sp}(\bar{2},2) \frac{\delta\chi_{sp}(\bar{2},\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}.
\end{aligned} \tag{N.16}$$

On prend $2 = 1$:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -\delta(1^+ - 4) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,3)G_\sigma(1,3^+) \\
& - \delta(1 - 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,4^-)G_\sigma(4^-,1^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,3)\chi_{sp}(4,1) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,4^-)\chi_{sp}(3,1) \\
& + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n}\right)\delta(3^+ - 4)\chi_{sp}^2(1,3) \\
& - \frac{U}{n^2}\chi_{sp}^2(1,\bar{2})\frac{\delta\chi_{sp}(\bar{2},\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)},
\end{aligned} \tag{N.17}$$

et en posant

$$\begin{aligned}
H_\sigma(1;3,4) = & -\delta(1^+ - 4) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,3)G_\sigma(1,3^+) \\
& - \delta(1 - 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,4^-)G_\sigma(4^-,1^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,3)\chi_{sp}(4,1) \\
& - \frac{U_{sp}}{2}G_\sigma(4^-,3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1,4^-)\chi_{sp}(3,1) \\
& + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n}\right)\delta(3^+ - 4)\chi_{sp}^2(1,3)
\end{aligned} \tag{N.18}$$

(N.17) se réécrit

$$\frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = H_\sigma(1;3,4) - \frac{U}{n^2}\chi_{sp}^2(1,\bar{2})\frac{\delta\chi_{sp}(\bar{2},\bar{2})}{\delta G_\sigma(3,4)}. \tag{N.19}$$

On a ici la même forme que (H.4), avec $\frac{U}{n^2}\chi_{sp}^2(\bar{2},1)$ à la place de $\frac{C}{2}\chi(1,1;\bar{2},\bar{2})$, la solution à cette équation est donc

$$\frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1,\bar{3})H_\sigma(\bar{3};3,4). \tag{N.20}$$

où

$$\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(\bar{1}, \bar{3}) = \frac{T}{N} \sum_q e^{iq(\bar{1}-\bar{3})} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \frac{T}{N} \sum_{q_1} \chi_{sp}(q - q_1) \chi_{sp}(q_1)}. \quad (\text{N.21})$$

ou encore

$$\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(\bar{1}, \bar{3}) = \frac{T}{N} \sum_q e^{iq(\bar{1}-\bar{3})} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \sum_2 e^{iq \cdot 2} \chi_{sp}(2) \chi_{sp}(2)}. \quad (\text{N.22})$$

Rappelons que, dans notre notation,

$$\sum_1 e^{iq \cdot 1} = \sum_{\mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1} \int_0^\beta d\tau e^{i\mathbf{k}_n \tau}. \quad (\text{N.23})$$

Au long, $\frac{\delta \chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)}$ s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{\delta \chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} &= \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) \left(-\delta(\bar{3}^+ - 4) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{3}, 3) G_\sigma(\bar{3}, 3^+) \right. \\ &\quad - \delta(\bar{3} - 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{3}, 4^-) G_\sigma(4^-, \bar{3}^+) \\ &\quad - \frac{U_{sp}}{2} G_\sigma(4^-, 3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{3}, 3) \chi_{sp}(4, \bar{3}) \\ &\quad - \frac{U_{sp}}{2} G_\sigma(4^-, 3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{3}, 4^-) \chi_{sp}(3, \bar{3}) \\ &\quad \left. + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \chi_{sp}^2(\bar{3}, 3) \right). \end{aligned} \quad (\text{N.24})$$

En développant et en intégrant les fonctions delta. on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\delta \chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} &= -\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 4^-) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(4^-, 3) G_\sigma(4^-, 3^+) \\ &\quad - \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(3, 4^-) G_\sigma(4^-, 3^+) \\ &\quad - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{3}, 3) \chi_{sp}(4, \bar{3}) \\ &\quad - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0}(\bar{3}, 4^-) \chi_{sp}(3, \bar{3}) \\ &\quad + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) \chi_{sp}^2(\bar{3}, 3). \end{aligned} \quad (\text{N.25})$$

Notons maintenant que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0}(1) &= \frac{T}{N} \sum_q e^{iq \cdot 1} \frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q)} \\
&= \frac{T}{N} \sum_q e^{iq \cdot 1} \left(\frac{1}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q)} - 1 \right) + \frac{T}{N} \sum_q e^{iq \cdot 1} \\
&= \frac{U_{sp}}{2} \frac{T}{N} \sum_q e^{iq \cdot 1} \frac{\chi_0(q)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(q)} + \delta(1) \\
&= \frac{U_{sp}}{2} \chi_{sp}(1) + \delta(1).
\end{aligned} \tag{N.26}$$

En utilisant cette forme dans (N.25) on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1, 1)}{\delta G_\sigma(3, 4)} &= -\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 4^-) \left(\frac{U_{sp}}{2}\chi_{sp}(4, 3) + \delta(3^+ - 4) \right) G_\sigma(4^-, 3^+) \\
&\quad - \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3) \left(\frac{U_{sp}}{2}\chi_{sp}(4, 3) + \delta(3^+ - 4) \right) G_\sigma(4^-, 3^+) \\
&\quad - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \left(\frac{U_{sp}}{2}\chi_{sp}(\bar{3}, 3) + \delta(\bar{3} - 3) \right) \chi_{sp}(4, \bar{3}) \\
&\quad - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \left(\frac{U_{sp}}{2}\chi_{sp}(\bar{3}, 4) + \delta(\bar{3} - 4^-) \right) \chi_{sp}(3, \bar{3}) \\
&\quad + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, \bar{3}) \chi_{sp}^2(\bar{3}, 3),
\end{aligned} \tag{N.27}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -2\delta(3^+ - 4) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3)G_\sigma(3,3^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,4)\chi_{sp}(4,3)G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3)\chi_{sp}(4,3)G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3)\chi_{sp}(4,3)G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - \frac{U_{sp}}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,4)\chi_{sp}(3,4)G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - \left(\frac{U_{sp}}{2}\right)^2 \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,\bar{3})\chi_{sp}(\bar{3},3)\chi_{sp}(4,\bar{3})G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - \left(\frac{U_{sp}}{2}\right)^2 \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,\bar{3})\chi_{sp}(\bar{3},4)\chi_{sp}(3,\bar{3})G_\sigma(4^-,3^+) \\
& + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n}\right)\delta(3^+ - 4) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,\bar{3})\chi_{sp}^2(\bar{3},3).
\end{aligned} \tag{N.28}$$

et en regroupant les termes et en notant que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,\bar{3})\chi_{sp}^2(\bar{3},3) &= \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} ((1-3) - \bar{4})\chi_{sp}^2(\bar{4}) \\
&= \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3)
\end{aligned} \tag{N.29}$$

on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & -2\delta(3^+ - 4) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3)G_\sigma(3,3^+) \\
& - U_{sp} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,4)\chi_{sp}(4,3)G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - U_{sp} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3)\chi_{sp}(4,3)G_\sigma(4^-,3^+) \\
& - \frac{U_{sp}^2}{2} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,\bar{3})\chi_{sp}(\bar{3},3)\chi_{sp}(4,\bar{3})G_\sigma(4^-,3^+) \\
& + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n}\right)\delta(3^+ - 4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}} (1,3).
\end{aligned} \tag{N.30}$$

Rappelons que l'on peut exprimer la self-énergie en fonction de la fonctionnelle de

Luttinger-Ward $\Phi[G]$ (Φ est la somme de tous les diagrammes “squelettes” fermés) comme

$$\Sigma_\sigma(1, 2) = \frac{\delta\Phi}{\delta G_\sigma(2, 1)}, \quad (\text{N.31})$$

par conséquent on a

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}(1, 2; 3, 4) = \frac{\delta\Sigma_\sigma(1, 2)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} = \frac{\delta^2\Phi}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)\delta G_\sigma(2, 1)} = \Gamma_{\sigma'\sigma}(4, 3; 2, 1) \quad (\text{N.32})$$

Dans l'ansatz (N.1), la self-énergie a la forme

$$\Sigma_\sigma(1, 2) = f_\sigma(1)\delta(1^- - 2) \quad (\text{N.33})$$

d'où

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}(1, 2; 3, 4) = \delta(1^- - 2) \frac{\delta f_\sigma(1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} \quad (\text{N.34})$$

d'autre part on a

$$\Gamma_{\sigma'\sigma}(4, 3; 2, 1) = \delta(4^- - 3) \frac{\delta f_{\sigma'}(4)}{\delta G_\sigma(2, 1)} \quad (\text{N.35})$$

Ces deux expressions peuvent être égales si

$$\frac{\delta f_\sigma(1)}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)} = \delta(4^- - 3) f'_{\sigma\sigma'}(1, 3) = \delta(4^- - 3) f'_{\sigma'\sigma}(3, 1) \quad (\text{N.36})$$

D'après (N.5), les propriétés (N.36) doivent être satisfaites par la fonction $\frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)}$. Or ces propriétés ne sont satisfaites que par le premier et le dernier terme de (N.30).

D'autre part, si on insérait (N.30) dans (N.5), le résultat n'aurait pas de sens puisque les transformées de Fourier des termes 2, 3 et 4 de (N.30) sont des fonctions complexes alors que $\Gamma_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)$ doit être une fonction réelle puisque $\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)$ est réel.

Afin d'obtenir un résultat sensé et satisfaire les propriétés (N.36), on doit poser qu'en fait ces trois termes ne sont valides que lorsque $4 = 3^+$ et qu'il sont proportionnel à $\delta(4 - 3^+)$. On a ainsi

$$\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 4)\chi_{sp}(4, 3)G_\sigma(4^-, 3^+) \approx C\delta(4 - 3^+)\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3), \quad (\text{N.37})$$

$$\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3)\chi_{sp}(4, 3)G_\sigma(4^-, 3^+) \approx C\delta(4 - 3^+)\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2}\chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3) \quad (\text{N.38})$$

et enfin

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, \bar{3}) \chi_{sp}(\bar{3}, 3) \chi_{sp}(4, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \\
&= \frac{1}{G_\sigma(\bar{3}, 3)} \left[\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, \bar{3}) \chi_{sp}(\bar{3}, 3) G(\bar{3}, 3) \right] \chi_{sp}(4, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \\
&\approx \frac{1}{G_\sigma(\bar{3}, 3)} \left[C \delta(\bar{3} - 3^+) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, \bar{3}) \right] \chi_{sp}(4, \bar{3}) G_\sigma(4^-, 3^+) \\
&= \frac{C}{G_\sigma(3^+, 3)} \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \chi_{sp}(4, 3) G_\sigma(4^-, 3^+) \\
&\approx \frac{C^2}{G_\sigma(3^+, 3)} \delta(4 - 3^+) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \quad (\text{N.39})
\end{aligned}$$

où on a utilisé à la fois l'approximation (N.37) et ensuite (N.38). Notons que ces approximations sont exactes lorsque $\chi_{sp}(1, 2) \propto \delta(1 - 2)$, ce qui correspond à la limite où l'ansatz (N.1) est exact. Ces approximations sont donc cohérentes avec le point de départ de la théorie. En remplaçant ces trois approximations dans (N.30) on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \chi_{sp}(1, 1)}{\delta G_\sigma(3, 4)} &= -2n_\sigma \delta(3^+ - 4) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \\
&\quad - 2U_{sp} C \delta(4 - 3^+) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \\
&\quad - \frac{U_{sp}^2 C^2}{2n_\sigma} \delta(4 - 3^+) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \\
&\quad + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3), \quad (\text{N.40})
\end{aligned}$$

où on a remplacé $G_\sigma(3^+, 3) = n_\sigma$. En regroupant les termes on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \chi_{sp}(1, 1)}{\delta G_\sigma(3, 4)} &= \delta(3^+ - 4) \left[- \left(2n_\sigma + 2U_{sp} C + \frac{U_{sp}^2 C^2}{2n_\sigma} \right) \frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1, 3) \right]. \quad (\text{N.41})
\end{aligned}$$

Maintenant, de manière similaire à (N.26), on a

$$\frac{1}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1) = -\frac{U}{n^2} \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}} (1) + \delta(1), \quad (\text{N.42})$$

on peut donc écrire

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & \delta(3^+ - 4) \left[- \left(2n_\sigma + 2U_{sp}C + \frac{U_{sp}^2 C^2}{2n_\sigma} \right) \delta(1-3) \right. \\ & + \frac{U}{n^2} \left(2n_\sigma + 2U_{sp}C + \frac{U_{sp}^2 C^2}{2n_\sigma} \right) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1,3) \\ & \left. + \left(\frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1,3) \right], \end{aligned} \quad (\text{N.43})$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} = & - \left(n + 2U_{sp}C + \frac{U_{sp}^2 C^2}{n} \right) \delta(1-3)\delta(3^+ - 4) \\ & + \left(\frac{U}{n} + \frac{2UU_{sp}C}{n^2} + \frac{UU_{sp}^2 C^2}{n^3} + \frac{U}{n^2} - \frac{U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1,3). \end{aligned} \quad (\text{N.44})$$

puisque $2n_\sigma = n$ dans l'état paramagnétique. Ensuite, par symétrie sous rotation du spin, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_\sigma(3,4)} + \frac{\delta\chi_{sp}(1,1)}{\delta G_{-\sigma}(3,4)} = & - \left(2n + 4U_{sp}C + \frac{2U_{sp}^2 C^2}{n} \right) \delta(1-3)\delta(3^+ - 4) \\ & + \left(\frac{2U}{n} + \frac{4UU_{sp}C}{n^2} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^3} + \frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1,3). \end{aligned} \quad (\text{N.45})$$

Avec cette expression le vertex irréductible de charge (N.5) devient

$$\begin{aligned} \Gamma_{ch}(1,2;3,4) = & -U \frac{\langle n_\sigma(1)n_{-\sigma}(1) \rangle}{\langle n_\sigma(1) \rangle^2} \delta(1-3)\delta(1^+ - 4)\delta(1^- - 2) \\ & + \frac{U}{\langle n_\sigma(1) \rangle} \delta(1^- - 2)\delta(1-3)\delta(1^+ - 4) \\ & - \frac{U}{2\langle n_\sigma(1) \rangle} \delta(1^- - 2) \left[- \left(2n + 4U_{sp}C + \frac{2U_{sp}^2 C^2}{n} \right) \delta(1-3)\delta(3^+ - 4) \right. \\ & \left. + \left(\frac{2U}{n} + \frac{4UU_{sp}C}{n^2} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^3} + \frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+ - 4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1,3) \right], \end{aligned} \quad (\text{N.46})$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) = & -U_{sp}\delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta(1^--2) \\
& + \frac{2U}{n}\delta(1^--2)\delta(1-3)\delta(1^+-4) \\
& - \frac{U}{n}\delta(1^--2) \left[- \left(2n + 4U_{sp}C + \frac{2U_{sp}^2 C^2}{n} \right) \delta(1-3)\delta(3^+-4) \right. \\
& \left. + \left(\frac{2U}{n} + \frac{4UU_{sp}C}{n^2} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^3} + \frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right) \delta(3^+-4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3) \right],
\end{aligned} \tag{N.47}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) = & \left(-U_{sp} + \frac{2U}{n} \right) \delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta(1^--2) \\
& + \left(2U + \frac{4UU_{sp}C}{n} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^2} \right) \delta(1-3)\delta(3^+-4)\delta(1^--2) \\
& - \frac{U}{n} \left(\frac{2U}{n} + \frac{4UU_{sp}C}{n^2} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^3} + \frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right) \delta(1^--2)\delta(3^+-4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3).
\end{aligned} \tag{N.48}$$

Enfin, le vertex irréductible de charge découlant de l'ansatz (N.1) est

$$\begin{aligned}
\Gamma_{ch}(1, 2; 3, 4) = & U_{ch}^{(0)}\delta(1-3)\delta(1^+-4)\delta(1^--2) \\
& - C_2\delta(1^--2)\delta(3^+-4) \frac{\chi_{sp} * \chi_{sp}}{1 + \frac{U}{n^2} \chi_{sp} * \chi_{sp}}(1, 3),
\end{aligned} \tag{N.49}$$

avec

$$\begin{aligned}
U_{ch}^{(0)} = & -U_{sp} + \frac{2U}{n} + 2U + \frac{4UU_{sp}C}{n} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^2} \\
C_2 = & \frac{U}{n} \left(\frac{2U}{n} + \frac{4UU_{sp}C}{n^2} + \frac{2UU_{sp}^2 C^2}{n^3} + \frac{2U}{n^2} - \frac{2U_{sp}}{n} \right),
\end{aligned} \tag{N.50}$$

et sa transformée de Fourier est

$$\Gamma_{ch}(q) = U_{ch}^{(0)} - C_2 \frac{(\chi_{sp} * \chi_{sp})(q)}{1 + \frac{U}{n^2} (\chi_{sp} * \chi_{sp})(q)}, \tag{N.51}$$

Bibliographie

- [1] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, and W. Hanke. Phase separation and competition of superconductivity and magnetism in the two-dimensional Hubbard model : from strong to weak coupling. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 76(22) :224509 – 1, 2007/12/01.
- [2] S. Allen, A.-M.S. Tremblay, and Y. M. Vilk. Conserving approximations vs two-particle self-consistent approach. In D. Sénéchal, C. Bourbonnais, and A.-M.S. Tremblay, editors, Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons, 2003.
- [3] Y. Ando, S. Komiya, K. Segawa, S. Ono, and Y. Kurita. Electronic phase diagram of high- T_c cuprate superconductors from a mapping of the in-plane resistivity curvature. Physical Review Letters, 93(26) :267001 – 1, 2004/12/31.
- [4] Ryotaro Arita, Shigeki Onoda, Kazuhiko Kuroki, and Hideo Aoki. Magnetic Properties of the Hubbard Model on Three-Dimensional Lattices : Fluctuation-Exchange and Two-Particle Self-Consistent Studies. Journal of the Physical Society of Japan, 69(3) :785–795, 2000.
- [5] G. Baym. Self-consistent approximations in many-body systems. Physical review, 127 :1391, 1962.
- [6] Gordon Baym and N. David Mermin. Determination of Thermodynamic Green's Functions. Journal of Mathematical Physics, 2(2) :232–234, 1961.
- [7] J. G. Bednorz and K. A. Müller. Possible high- T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 64 :189–193, 1986.
- [8] N.E. Bickers and D.J. Scalapino. Conserving approximations for strongly fluctuating electron systems. i. formalism and calculational approach. Ann. Phys. (USA), 193(1) :206 – 51, 1989.
- [9] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, An Introduction. Oxford University Press, 2005.
- [10] N. Bulut, D.J. Scalapino, and S.R. White. Bethe-Salpeter eigenvalues and amplitudes for the half-filled two-dimensional Hubbard model. Physical Review B (Condensed Matter), 47(21) :14599 – 602, 1993/06/01.
- [11] S. Chakravarty, B.I. Halperin, and D.R. Nelson. Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures. Physical Review B (Condensed Matter), 39(4) :2344 – 71, 1989/02/01.

- [12] James W. Cooley and John W. Tukey. An algorithm for the machine calculation of complex fourier series. Math. Comp., 19 :297–301, 1965.
- [13] E. Dagotto. Numerical studies of strongly correlated electronic models. International Journal of Modern Physics B, 5(1-2) :77 – 112, 1991/01/.
- [14] E. Dagotto. Correlated electrons in high-temperature superconductors. Reviews of Modern Physics, 66(3) :763 – 840, 1994/07/.
- [15] E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, J. Riera, and D.J. Scalapino. Optical conductivity of the two-dimensional Hubbard model. Physical Review B (Condensed Matter), 45(17) :10107 – 10, 1992/05/01.
- [16] T. Dahm, L. Tewordt, and S. Wermbter. Spin mode, electrical resistivity, and thermal conductivity for the two-dimensional Hubbard model. Physical Review B (Condensed Matter), 49(1) :748 – 51, 1994/01/01.
- [17] R. Daou, Nicolas Doiron-Leyraud, David LeBoeuf, S. Y. Li, Francis Laliberte, Olivier Cyr-Choiniere, Y. J. Jo, L. Balicas, J.-Q. Yan, J.-S. Zhou, J. B. Goodenough, and Louis Taillefer. Linear temperature dependence of resistivity and change in the Fermi surface at the pseudogap critical point of a high- T_c superconductor. Nat Phys, 5(1) :31–34, January 2009.
- [18] A. Dar , Y.M. Vilk, and A.-M.S. Tremblay. Crossover from two- to three-dimensional critical behavior for nearly antiferromagnetic itinerant electrons. Phys. Rev. B, 53 :14236 – 51, 1996.
- [19] N. Doiron-Leyraud, P. Auban-Senzier, S. R. de Cotret, A. Sedeki, C. Bourbonnais, D. Jerome, K. Bechgaard, and L. Taillefer. Correlation between linear resistivity and T_c in organic and pnictide superconductors. ArXiv e-prints, May 2009.
- [20] Nicolas Doiron-Leyraud, Pascale Auban-Senzier, Samuel Ren  de Cotret, Claude Bourbonnais, Denis J rome, Klaus Bechgaard, and Louis Taillefer. Correlation between linear resistivity and T_c in the Bechgaard salts and the pnictide superconductor $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$. Phys. Rev. B, 80(21) :214531, Dec 2009.
- [21] P. Fournier, P. Mohanty, E. Maiser, S. Darzens, T. Venkatesan, C.J. Lobb, G. Czjzek, R.A. Webb, and R.L. Greene. Insulator-metal crossover near optimal doping in $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$: anomalous normal-state low temperature resistivity. Phys. Rev. Lett., 81(21) :4720 – 3, 1998.
- [22] S. Friederich, H. C. Krahle, and C. Wetterich. Four-point vertex in the Hubbard model and partial bosonization. Phys. Rev. B, 81(23) :235108, Jun 2010.
- [23] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M.J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. Rev. Mod. Phys., 68 :13 – 25, 1996.
- [24] W. Hanke, M. Aichhorn, E. Arrigoni, and M. Potthoff. Correlated band structure and the ground-state phase diagram in high-TC cuprates. Physica B, 378-380 :60 – 3, 2006/05/01.

- [25] V. Hankevych, B. Kyung, A.-M. Daré, D. Sénéchal, and A.-M.S. Tremblay. Strong- and weak-coupling mechanisms for pseudogap in electron-doped cuprates. In Proceedings of SNS2004, 2005.
- [26] S. R. Hassan, B. Davoudi, B. Kyung, and A.-M. S. Tremblay. Conditions for magnetically induced singlet d -wave superconductivity on the square lattice. Phys. Rev. B, 77(9) :094501, Mar 2008.
- [27] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 276(1365) :pp. 238–257, 1963.
- [28] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. II. The Degenerate Band Case. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 277(1369) :pp. 237–259, 1964.
- [29] N.E. Hussey. Phenomenology of the normal state in-plane transport properties of high- T_c cuprates. Journal of Physics : Condensed Matter, 20(12) :123201 (17 pp.) –, 2008/03/26.
- [30] M. Jarrell, Th. Maier, C. Huscroft, and S. Moukouri. Quantum monte carlo algorithm for nonlocal corrections to the dynamical mean-field approximation. Phys. Rev. B, 64 :195130 – 1, 2001.
- [31] Mark Jarrell and J. E. Gubernatis. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum monte carlo data. Physics Reports, 269(3) :133 – 195, 1996.
- [32] L.P. Kadanoff and G. Baym. Quantum Statistical Mechanics. Benjamin, 1962.
- [33] S. S. Kancharla, B. Kyung, D. Senechal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, and A.-M. S. Tremblay. Anomalous superconductivity and its competition with antiferromagnetism in doped mott insulators. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 77(18) :184516, 2008.
- [34] P.R.C. Kent, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, O.K. Andersen, A. Macridin, T.A. Maier, M. Jarrell, and T.C. Schulthess. Combined density functional and dynamical cluster quantum Monte Carlo calculations of the three-band Hubbard model for hole-doped cuprate superconductors. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 78(3) :035132 – 1, 2008/07/15.
- [35] H. Kontani. Theory of infrared hall conductivity based on the fermi liquid theory : Analysis of high- t_c superconductors. Journal of the Physical Society of Japan, 76(7) :074707 – 1, 2007/07.
- [36] H. Kontani, K. Kanki, and K. Ueda. Hall effect and resistivity in high- T_c superconductors : The conserving approximation. Physical Review B (Condensed Matter), 59(22) :14723 – 39, 1999/06/01.
- [37] Gabriel Kotliar, Sergej Y. Savrasov, Gunnar Pálsson, and Giulio Biroli. Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems. Phys. Rev. Lett., 87(18) :186401, Oct 2001.

- [38] H. C. Krah1, S. Friederich, and C. Wetterich. Incommensurate antiferromagnetic fluctuations in the two-dimensional Hubbard model. Phys. Rev. B, 80(1) :014436, Jul 2009.
- [39] H.C. Krah1, J.A. Muller, and C. Wetterich. Generation of d-wave coupling in the two-dimensional Hubbard model from functional renormalization. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 79(9) :094526 (11 pp.) –, 2009/03/01.
- [40] H.C. Krah1 and C. Wetterich. Functional renormalization group for d-wave superconductivity. Physics Letters A, 367(4-5) :263 – 67, 2007/07/30.
- [41] B. Kyung, S. S. Kancharla, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay, M. Civelli, and G. Kotliar. Pseudogap induced by short-range spin correlations in a doped mott insulator. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 73(16) :165114, 2006.
- [42] B. Kyung, J.-S. Landry, and A. M. S. Tremblay. Antiferromagnetic fluctuations and d-wave superconductivity in electron-doped high-temperature superconductors. Phys. Rev. B, 68 :174502, 2003.
- [43] B. Kyung, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay. Pairing dynamics in strongly correlated superconductivity. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 80(20) :205109, 2009.
- [44] P.A. Lee, N. Nagaosa, and Xiao-Gang Wen. Doping a Mott insulator : physics of high-temperature superconductivity. Reviews of Modern Physics, 78(1) :17 – 85, 2006/01/.
- [45] Wen-Zhu Li, Feng Chen, Tie-Feng Xu, and He-Ping Ying. Finite-temperature optical conductivity of the two-dimensional Hubbard model. Communications in Theoretical Physics, 22(3) :273 – 6, 1994/10/30.
- [46] Elliott H. Lieb and F. Y. Wu. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension. Phys. Rev. Lett., 20(25) :1445–1448, Jun 1968.
- [47] Nan Lin, Emanuel Gull, and A. J. Millis. Optical conductivity from cluster dynamical mean-field theory : Formalism and application to high-temperature superconductors. Phys. Rev. B, 80(16) :161105, Oct 2009.
- [48] A. Lucarelli, S. Lupi, P. Calvani, P. Maselli, G. De Marzi, P. Roy, N.L. Saini, A. Bianconi, T. Ito, and K. Oka. Optical conductivity of the nonsuperconducting cuprate $\text{La}_{8-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_8\text{O}_{20}$. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 65(5) :054511 – 1, 2002/02/01.
- [49] J. M. Luttinger and J. C. Ward. Ground-State Energy of a Many-Fermion System II. Phys. Rev., 118(5) :1417–1427, Jun 1960.
- [50] H. Maebashi and H. Fukuyama. Electrical conductivity of interacting fermions. I. General formulation. Journal of the Physical Society of Japan, 66(11) :3577 – 90, 1997/11/.

- [51] H. Maebashi and H. Fukuyama. Electrical conductivity of interacting fermions. II. Effects of normal scattering processes in the presence of umklapp scattering processes. Journal of the Physical Society of Japan, 67(1) :242 – 51, 1998/01/.
- [52] T. A. Maier, M. Jarrell, T. C. Schulthess, P. R. C. Kent, and J. B. White. Systematic study of d-wave superconductivity in the 2d repulsive hubbard model. Physical Review Letters, 95(23) :237001, 2005.
- [53] Th. Maier, M. Jarrell, Th. Pruschke, and J. Keller. d-wave superconductivity in the hubbard model. Phys. Rev. Lett., 85(7) :1524 – 7, 2000.
- [54] R.S. Markiewicz, S. Sahrakorpi, M. Lindroos, H. Lin, and A. Bansil. One-band tight-binding model parametrization of the high-Tc cuprates including the effect of k_z dispersion. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 72(5) :54519 – 1, 2005/08/01.
- [55] Takeo Matsubara. A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics. Progress of Theoretical Physics, 14(4) :351–378, 1955.
- [56] L.F. Mattheiss. Electronic band properties and superconductivity in $La_{2-y}X_yCuO_4$. Physical Review Letters, 58(10) :1028 – 30, 1987/03/09.
- [57] N.D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. Physical Review Letters, 17(22) :1133 – 1136, 1966.
- [58] S. Moukouri, S. Allen, F. Lemay, B. Kyung, D. Poulin, Y.M. Vilk, and A.-M.S. Tremblay. Many-body theory versus simulations for the pseudogap in the hubbard model. Phys. Rev. B, 61 :7887 – 92, 2000.
- [59] H. Nakano and M. Imada. Optical conductivity of the two-dimensional Hubbard model. Journal of the Physical Society of Japan, 68(4) :1458 – 9, 1999/04/.
- [60] Y. Onose, Y. Taguchi, K. Ishizaka, and Y. Tokura. Charge dynamics in underdoped $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$: pseudogap and related phenomena. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 69(2) :24504 – 1, 2004/01/01.
- [61] I. Paul and G. Kotliar. Thermal transport for many-body tight-binding models. Phys. Rev. B, 67(11) :115131, March 2003.
- [62] M. Potthoff. Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons. Eur. Phys. J. B (France), 32(4) :429 – 436, 2003.
- [63] M. Potthoff. Non-perturbative construction of the Luttinger-Ward functional. Condensed Matter Physics, 9(3) :557, 2006.
- [64] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken. Variational Cluster Approach to Correlated Electron Systems in Low Dimensions. Phys. Rev. Lett., 91 :206402, 2003.
- [65] J.A. Riera and E. Dagotto. Optical conductivity of the Hubbard model at finite temperature. Physical Review B (Condensed Matter), 50(1) :452 – 6, 1994/07/01.

- [66] P. Rivero, I. de P R Moreira, and F. Illas. Electronic structure of single-layered undoped cuprates from hybrid density functional theory. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 81(20) :205123 (12 pp.) –, 2010/05/03.
- [67] D.J. Scalapino. The 2D Hubbard model and the high Tc cuprate problem. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 19(3-5) :195 – 200, 2006/07/.
- [68] D.J. Scalapino, Jr. Loh, E., and J.E. Hirsch. d-wave pairing near a spin-density-wave instability. Phys. Rev. B, 34 :8190 – 2, 1986.
- [69] D. Sénéchal, D. Perez, and D. Plouffe. Cluster Perturbation Theory for Hubbard models. Phys. Rev. B, 66 :075129, 2002.
- [70] David Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, and A.-M. S. Tremblay. Competition between antiferromagnetism and superconductivity in high-t[sub c] cuprates. Phys. Rev. Lett., 94 :156404, 2005.
- [71] G. Sordi, K. Haule, and A.-M.S. Tremblay. Finite Doping Signatures of the Mott Transition in the Two-dimensional Hubbard Model. Physical Review Letters, 104(22) :226402 (4 pp.) –, 2010/06/04.
- [72] T. Tohyama, Y. Inoue, K. Tsutsui, and S. Maekawa. Exact diagonalization study of optical conductivity in the two-dimensional Hubbard model. Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics), 72(4) :45113 – 1, 2005/07/15.
- [73] Matthias Troyer and Philipp Werner. Quantum Monte Carlo Simulations. AIP Conference Proceedings, 1162(1) :98 – 173, 2009.
- [74] Matthias Troyer and Uwe-Jens Wiese. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations. Phys. Rev. Lett., 94(17) :170201, May 2005. .
- [75] Y.M. Vilk and A.-M.S. Tremblay. Non-perturbative many-body approach to the hubbard model and single-particle pseudogap. J. Phys I (France), 7 :1309 – 68, 1997.
- [76] Y. Yanase. Theory of electric transport in the pseudogap state of high-Tc cuprates. Journal of the Physical Society of Japan, 71(1) :278 – 92, 2002/01/.
- [77] A. Zimmers, J.M. Tomczak, R.P.S.M. Lobo, N. Bontemps, C.P. Hill, M.C. Barr, Y. Dagan, R.L. Greene, A.J. Millis, and C.C. Homes. Infrared properties of electron-doped cuprates : tracking normal-state gaps and quantum critical behavior in $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$. Europhysics Letters, 70(2) :225 – 31, 2005/04/15.